

**Министерство образования и науки Российской Федерации**  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего  
профессионального образования  
«Уральский федеральный университет  
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УДК 550.32, 550.36

№ госрегистрации 01201065613

Инв. № 14.740.11.0197/5

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по науке УрФУ,

к.физ.-мат.н., доцент

\_\_\_\_\_ В.В. Кружаев

«21» сентября 2012 г.

ОТЧЕТ

О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

В рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры  
инновационной России» на 2009-2013 годы

(Шифр заявки «2010-1.1-153-118-007»

Государственный контракт № 14.740.11.0197 от «15» сентября 2010 г.)

по теме:

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МАГМАТИЧЕСКИХ РАСПЛАВАХ И ЯДРЕ  
ЗЕМЛИ: НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА ПРИ  
ЗАТВЕРДЕВАНИИ И РОЛЬ МАГНИТОГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ДИНАМО  
(заключительный, этап № 5)

Наименование этапа: «Затвердевание ядра Земли: дестабилизирующие факторы, коллапс  
двухфазной зоны и междендритное расстояние»

Руководитель НИР, д-р физ.-мат. наук, проф.

\_\_\_\_\_

Д.В. Александров

«21» сентября 2012 г.

Екатеринбург 2012

## СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель темы, профессор кафедры математической физики, д.физ.-мат.н.	_____	Д.В. Александров (реферат, разделы 1-5, заключение)
Исполнители темы:		
зам. проректора по науке, профессор кафедры математической физики, д.физ.-мат.н.	_____	А.О. Иванов (введение, раздел 2)
профессор кафедры математической физики, д.физ.-мат.н.	_____	А.Ю. Зубарев (разделы 1, заключение)
директор центра прикладной информатики, д.физ.-мат.н.	_____	В.С. Нустров (разделы 1, 3)
профессор кафедры технической физики, д.физ.-мат.н.	_____	Л.М. Мартюшев (раздел 5)
с.н.с. НИЧ, к.физ.-мат.н.	_____	А.П. Малыгин (разделы 1, 2, 5, заключение)
помощник проректора по науке, к.соц.н.	_____	В.В. Полякова (заключение, приложения)
н.с. НИЧ, к.физ.-мат.н.	_____	И.Г. Низовцева (разделы 4, 5)
н.с. НИЧ, к.физ.-мат.н.	_____	А.А. Иванов (разделы 3, 4)
инженер-исследователь НИЧ	_____	Д.Н. Чириков (раздел 2)
стажер-исследователь НИЧ	_____	В.С. Зверев (разделы 1, 3)
н.с. НИЧ, к.физ.-мат.н.	_____	Е.В. Крутикова (раздел 2)
аспирант, стажер- исследователь НИЧ	_____	А.В. Нетреба (Бритоусова) (раздел 1)
аспирант	_____	И.О. Стародумов (раздел 3)
аспирант	_____	И.М. Субботин (раздел 2)

студент	_____	К.С. Щербинин (раздел 4)
	«21» сентября 2012 г.	
студент	_____	Д.А. Пинигин (раздел 2)
	«21» сентября 2012 г.	
студент	_____	Г.Ю. Дубовой (разделы 3, 4)
	«21» сентября 2012 г.	
студент	_____	И.С. Шахматов (раздел 5)
	«21» сентября 2012 г.	
Нормоконтролер: Начальник управления научных исследований	_____	В.Н. Ларионов
	«21» сентября 2012 г.	

## РЕФЕРАТ

Отчет 137 с., 81 источник, 19 рисунков, 4 табл., 5 прил.

Ключевые слова: фазовые переходы, морфологическая неустойчивость, концентрационное переохлаждение, затвердевание, ядро Земли, магматические расплавы, двухфазная зона, нелинейная динамика, тепломассоперенос, дендриты.

Объектом исследований является изучение нелинейной динамики затвердевания расплава жидкой части ядра Земли с двухфазной зоной. В ходе выполнения НИР были решены следующие задачи, поставленные в проекте: 1. Теоретически определены основные параметры системы, дестабилизирующие процесс затвердевания и выявлена роль этих параметров на ширину областей неустойчивости; 2. Аналитически найден критерий динамической неустойчивости затвердевания ядра Земли для самых опасных (быстрорастущих) возмущений, соответствующих нулевому волновому числу; 3. Определены условия коллапса двухфазной зоны и установлены ее реальные размеры на основе развитой теории; 4. Найдено характерное междендритное расстояние матрицы твердой фазы жидкой части ядра Земли; 5. Изучены и проанализированы известные данные по междендритному расстоянию и протяженности двухфазной зоны в затвердевающем ядре Земли, существующие в мировой литературе; 6. Выполнено сравнение полученных зависимостей по дестабилизирующим факторам, размерам двухфазной области, ее коллапсу и междендритному расстоянию с известными данными, существующими в мировой литературе; 7. Разработана программа внедрения результатов НИР в образовательный процесс.

Разработана теория затвердевания ядра Земли при наличии протяженной области фазового перехода. Определены точные аналитические решения сферически-симметричных уравнений тепломассопереноса во фронтальном приближении. Эти решения показывают, что скорость роста ядра больше в тех регионах, где более холодный расплав опускается к ядру, и меньше там, где более горячий расплав поднимается от ядра. Эти аналитические решения также показывают, что около межфазной границы ядра возникает концентрационное переохлаждение, являющееся причиной ее морфологической неустойчивости. Далее проводится линейный анализ этой неустойчивости при наличии конвективных течений расплава и выводится новый критерий морфологической устойчивости земного ядра, зависящий от нового параметра системы - скорости растяжения. Поскольку такая неустойчивость приводит к развитию области фазового перехода, далее строится теория двухфазной зоны земного ядра и разрабатываются аналитические методы решения ее

уравнений. Найденное решение затем позволяет получить ряд оценок параметров области фазового перехода.

Подробные результаты развитой теории заключаются в следующем. Откорректированы аналитические решения уравнений тепломассопереноса в жидком ядре Земли для безконвективного фронтального процесса затвердевания. Определены сферически-симметричные распределения концентрации примеси и энтропии в расплаве ядра, а также зависимость скорости его роста от теплофизических параметров системы. Показано, что скорость затвердевания ядра Земли является возрастающей функцией удельного неадиабатического теплового потока. Получены аналитические решения уравнений тепломассопереноса в жидком ядре Земли во фронтальном режиме кристаллизации с конвекцией. Определены соответствующие сферически-симметричные распределения концентрации примеси и энтропии. На основе найденных решений фронтальной модели показано, что скорость роста ядра больше в тех регионах, где более холодный расплав опускается к ядру и меньше в регионах, где поднимается более горячий расплав. Эта разница температур и скоростей является причиной морфологической неустойчивости межфазной границы. На основе найденных фронтальных решений уравнений тепломассопереноса в жидком ядре показано, что около границы с твердым ядром всегда появляется концентрационное переохлаждение, также являющееся причиной морфологической неустойчивости локально-плоской границы фазового перехода. Проведен линейный анализ морфологической неустойчивости локально-плоской межфазной границы ядра Земли при наличии конвективных течений расплава. Получен новый критерий морфологической неустойчивости и определена кривая нейтральной устойчивости процесса. Показано, что при различных скоростях течения расплава возможна реализация морфологически устойчивой и неустойчивой кристаллизации, существующей одновременно с концентрационным переохлаждением, что приводит к двум сценариям затвердевания: "концентрационное переохлаждение и морфологическая устойчивость" и "концентрационное переохлаждение и морфологическая неустойчивость". Развита математическая модель двухфазной области, соответствующие найденным сценариям затвердевания ядра Земли. Получены приближенные аналитические решения этих моделей без учета зависимости параметров процесса от изменения давления и плотности. Развита более полная модель процесса затвердевания земного ядра с областью фазового перехода, учитывающая течения расплава, зависимость фазовой диаграммы от концентрации примеси и давления, зависимость скорости течения жидкости от давления и проницаемости двухфазной зоны. Найдены приближенные аналитические решения этой нелинейной модели. Определены распределения температуры и концентрации примеси в области фазового перехода, доля

твёрдой фазы, скорость затвердевания ядра Земли, протяженность двухфазной зоны. Определены допустимые интервалы изменений динамической вязкости и наклона линии ликвидус, соответствующие формированию области фазового перехода у твёрдого ядра Земли. Найдено междендритное расстояние и средний радиус вершины растущих в области фазового перехода дендритов. Показано, что в двухфазной зоне существуют узкие протоки восходящего (горячего) расплава, а в остальной области более холодный расплав опускается к ядру. Определены характерные расстояния между такими каналами и их средний радиус. Детализировано устройство области фазового перехода ядра Земли.

Научные результаты в полном объеме представлены в тексте настоящего отчета, а также приведены в разделах «Обобщение результатов работы по всем этапам» и «Заключение» в более детальной форме.

Полученные результаты показывают, что поставленные задачи решены полностью. Уровень полученных результатов соответствует мировому уровню, о чем свидетельствуют публикации коллектива авторов в престижных реферируемых изданиях (раздел «Обобщение результатов работы по всем этапам»). Использование полученных результатов будет осуществляться в дальнейшей научной работе участников проекта, а также в учебном процессе в Уральском федеральном университете.

Все результаты получены впервые и обладают научной новизной. Областью применения результатов являются геофизические задачи затвердевания ядра Земли и связанные с ними проблемы генерации и поддержания геодинамо планеты, проблемы кристаллизации магматических расплавов и морских льдов, а также схожие по постановке задачи прикладной физики, которые имеют одну или несколько движущихся границ фазового перехода.

Полученные результаты опубликованы и приняты к печати в ведущих реферируемых журналах. По результатам проекта на пятом этапе к защите представлены одна докторская и одна кандидатская диссертации, согласно заявленным индикаторам.

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение	8
Основная часть	11
1. Определение основных параметров системы, дестабилизирующих процесс затвердевания и выявление роли этих параметров на ширину областей неустойчивости	26
2. Нахождение критерия динамической неустойчивости затвердевания ядра Земли для самых опасных (быстрорастущих) возмущений, соответствующих нулевому волновому числу	31
3. Определение условий коллапса двухфазной зоны и ее реальных размеров на основе развитой теории	39
4. Нахождение характерного междендритного расстояния матрицы твердой фазы жидкой части ядра Земли	58
5. Изучение и анализ известных данных по междендритному расстоянию и протяженности двухфазной зоны в затвердевающем ядре Земли, существующих в мировой литературе	60
6. Сравнение полученных зависимостей по дестабилизирующим факторам, размерам двухфазной области, ее коллапсу и междендритному расстоянию с известными данными, существующими в мировой литературе	60
7. Разработка программы внедрения результатов НИР в образовательный процесс	63
8. Обобщение результатов работы по всем этапам	66
Заключение	83
Список использованных источников	87
Приложения	95

## Введение

Хорошо известно, что в настоящее время механизм геодинамо считается одним из основных механизмов, управляющих возникновением и динамикой магнитного поля Земли и других планет Солнечной системы [1]. Этот механизм основан на существовании токопроводящих конвективных течений расплава во внешнем ядре, которые приводят к возникновению кольцеобразных электрических токов. Благодаря взаимодействию электрических полей с конвективными течениями во внешнем ядре возникает результирующее магнитное поле дипольного характера, ось которого приблизительно совпадает с осью вращения Земли. Для "запуска" подобного процесса необходимо начальное магнитное поле, генерируемое гиромангнитным эффектом, когда вращающееся тело намагничивается в направлении оси его вращения. Магнитные силовые линии, определяемые в компьютерных моделях геодинамо, показывают, насколько структура магнитного поля Земли выглядит проще за ее пределами, чем внутри ядра. Там, вместо правильных силовых линий, наблюдаются переплетенные между собой линии поля. Однако известно, что магнитные полюса планеты не всегда располагались так, как сегодня. Исследования минералов показывают, что магнитное поле Земли за 4-5 млрд. лет существования планеты меняло свою ориентацию с севера на юг и обратно сотни раз. Сравнение современных данных по измерениям магнитного поля Земли с первыми измерениями, проведенными в начале 30-х гг. XIX в. показывают, что магнитное поле за этот сравнительно небольшой промежуток времени ослабло почти на 10 %. Археомангнитные исследования говорят о том, что убывание напряженности магнитного поля продолжается уже достаточно давно - около двух тысячелетий, причем в последние века особенно интенсивно. Если скорость убывания поля не изменится, то его напряженность достигнет нулевой отметки приблизительно за 1200 лет.

Геологические данные свидетельствуют о том, что периодически на нашей планете происходила смена магнитных полюсов, при которой Северный и Южный полюса менялись местами. При этом, сначала дипольное магнитное поле Земли исчезает, и вместо него наблюдается более сложная структура множественных полюсов, разбросанных по планете. Затем дипольное поле восстанавливается, но Северный и Южный полюса при этом меняются местами. Последний раз такое случалось приблизительно 780 тыс. лет назад. Отметим, что такие перемены должны происходить в течение достаточно коротких временных промежутков. Сравнительная оценка предельного времени переполюсовки в 1200 лет (при неизменной скорости спадания поля) с периодом в 780 тыс. лет показывает, что в настоящее



время Земля находится в преддверии этого процесса. Однако интенсивность убывания поля в последнее время может свидетельствовать и о более быстром (неравномерном) его спадании.

Механизм смены полюсов Земли непосредственно связан с механизмом геодинамо. Магнитное поле планеты генерируется при взаимодействии внутреннего твердого ядра и внешнего расплавленного ядра планеты, в котором циркулирует огромная масса расплавленного железа. Здесь важно отметить условия протекания такого процесса, существенно отличающиеся от условий на поверхности планеты. Первое: огромное давление (приблизительно в  $10^6$  раз выше, чем на поверхности Земли), создаваемое внешним жидким ядром и внешней мантией на внутреннее ядро, в основном состоящее из железа. Второе: крайне высокая температура ( $5000 - 6000^\circ \text{K}$ ) поверхности твердого ядра разогревает расплав, который поднимается вверх по направлению к вышележащей мантии, отдает тепло и, остывая (при остывании жидкое железо становится плотнее), опускается обратно вниз по направлению к горячему ядру. Третье: возникающая при вращении Земли сила Кориолиса отклоняет движение поднимающейся массы в жидком ядре и закручивает ее в спираль. Эксперименты показывают, что длительные изменения геомагнитного поля возникают на границе жидкого ядра и мантии в тех местах, где направление геомагнитного потока обратно нормальному для данного полушария. Самый большой из таких "аномальных" участков обратного магнитного поля протянулся от южной оконечности Африки до Южной Америки. На данном участке магнитный поток направлен внутрь, к ядру, в то время как большая часть его в Южном полушарии направлена из центра.

Районы, где магнитное поле направлено в противоположную для данного полушария сторону, возникают при случайном прорыве закрученных и петляющих линий магнитного поля за пределы ядра Земли. Участки обратного магнитного поля могут существенно ослабить магнитное поле на поверхности Земли, называемое диполем, и свидетельствовать о начале смены земных полюсов. Они появляются, когда поднимающаяся за счет конвективных движений расплава жидкая масса проталкивает горизонтальные магнитные линии вверх во внешнем ядре. Такое конвективное движение иногда закручивает и выдавливает магнитную линию внутрь мантии. Одновременно силы вращения Земли вызывают винтовую циркуляцию расплава, которая может затянуть на такой линии петлю. Новые участки обратного магнитного поля продолжают формироваться, например, на границе ядро-мантия под восточным побережьем Северной Америки и Арктикой, а ранее известные участки увеличиваются и сдвигаются в сторону полюсов. При глобальном наступлении смены полюсов участки обратного магнитного поля могут разрастаться по всему региону вблизи географических полюсов, о чем свидетельствуют данные компьютерного моделирования. Об этом же свидетельствуют и данные космических

наблюдений. Карты магнитного поля Земли на границе ядро-мантия, составленные по измерениям, сделанным со спутника, показывают, что большая часть магнитного потока направлена от центра Земли в Южном полушарии и к центру в Северном. Но в некоторых районах складывается обратная картина. Участки обратного магнитного поля существенно выросли по числу и размерам за последние 30 лет. Если они заполнят все пространство у обоих полюсов, то может произойти переполяризация.

Поскольку взаимодействие между внутренним (твердым) и внешним (расплавленным) ядром генерирует и поддерживает механизм геодинамо, представляется особенно важным исследовать процессы конвективного теплопереноса и магнитной гидродинамики на границе их раздела. Так, совсем недавно в предположении плоской границы раздела между внутренним и внешним ядром было показано, что магнитное поле порождает джоулево тепло, которое, в свою очередь, усиливает конвекцию во внешнем ядре [2]. Однако предположение о локально плоской форме твердого ядра Земли является достаточно далеким от действительности, что, например, подтверждается данными сейсмологических наблюдений [3].

Вообще говоря, твердое ядро Земли формируется благодаря затвердеванию жидкого ядра. Перераспределение примеси, появляющееся за счет ее вытеснения растущей твердой фазой, ответственно за возникновение конвекции и, в целом, за геодинамо [4]. Другими словами, течения жидкой фазы системы возникают благодаря архимедовой силе, которая обусловлена всплыванием легкой примеси от границы с внутренним твердым ядром в процессе роста последнего. Такой процесс осложнен еще одним важным явлением. Вытеснение примеси и ее накопление в отдельных участках растущей твердой матрицы жидкого слоя приводит к возникновению концентрационного переохлаждения [5], которое может очень сильно изменить все параметры системы. Увеличение примеси в отдельных участках расплава ядра и возникновение переохлаждения приводят к понижению температуры фазового перехода и создают преимущественные условия для роста отдельных выступов твердой фазы (например, дендритоподобных образований). При этом, процесс затвердевания будет приводить к частичному снятию этого переохлаждения за счет выделения скрытой теплоты фазового превращения. Детальное изучение динамики такой системы представляет собой очень сложную задачу, учитывающую рост отдельных элементов твердой фазы и кинетику снятия переохлаждения. Благодаря такому сложному взаимодействию концентрационного переохлаждения с фазовым превращением, выделяющейся скрытой теплотой и конвективными течениями, жидкое ядро Земли представляет собой область двухфазного состояния вещества.

## Основная часть

Первое успешное численное решение трехмерной модели магнитогидродинамического динамо было получено в 1995 г. в упрощенном приближении Буссинеска [6]. В силу сделанных упрощений применимость этой модели к реальным планетам вызвало определенные сомнения. Поэтому в 1997 г. те же авторы построили несколько частных решений полной системы уравнений геодинамо [7], которая была ранее получена в более реалистичном для ядер планет неэластичном приближении [8]. После этих работ было построено большое число численных решений моделей магнитогидродинамического динамо, основанных на упрощенном предположении Буссинеска. Такие решения также порой использовали трактовку вязко-диффузионных эффектов на основе соображений устойчивости численных схем (см., например, статью [9]). Такой подход приводит к непомерному (на несколько порядков) завышению коэффициентов переноса по сравнению с их планетарными величинами [10] и к таким нефизичным эффектам, как гипервязкость.

Перед тем, как приступить к решению полной системы уравнений магнитогидродинамического динамо, необходимо сначала решить более простую задачу - описать процессы тепломассопереноса в ядре Земли и планетах земной группы без учета магнитного поля. В настоящем разделе материал излагается в соответствии с теорией работ [11, 12], где была выполнена первая попытка построения подобных аналитических решений тепломассообменной задачи. Однако, авторами работ [11, 12] была допущена неточность, которая сказывается на физической интерпретации результатов [13]. Корректировка этой теории и построение правильной физической картины тепломассопереноса в жидком ядре Земли на основе фронтальной модели и представляют собой новизну излагаемого материала настоящего раздела.

Рассмотрим сферический слой жидкого ядра Земли, находящийся в состоянии, близком к состоянию гидростатического равновесия, которое соответствует отсутствию конвекции. Это состояние, которое полностью определено, называется RS-состоянием (Reference State). Все физические величины, соответствующие этому состоянию, обозначаются чертой сверху. Массовая доля легкой примеси (концентрация) обозначается через  $C$ , а удельная энтропия - через  $S$ .

Исходное RS-состояние соответствует адиабатическому хорошо перемешанному состоянию. Это означает, что RS-концентрация и энтропия зависят только от времени, т.е.

$$\nabla \bar{C} = 0, \nabla \bar{S} = 0. \quad (1)$$

Остальные физические величины в RS-состоянии (плотность  $\bar{\rho}$ , давление  $\bar{p}$ , температура  $\bar{T}$  и химический потенциал  $\bar{\mu}$ ) являются функциями времени  $t$  и сферического радиуса  $r$ , который равен нулю в центре планеты. Радиальная производная обозначается штрихом. Так, например, производная химического потенциала

$$\bar{\mu}' = \frac{d\bar{\mu}}{dr} \approx 0.6\bar{g}$$

пропорциональна гравитационному ускорению  $\bar{g}$  [8], которое в RS-состоянии связано с адиабатическим температурным градиентом

$$\bar{T}' = \frac{\alpha \bar{T} \bar{g}}{c_p},$$

где  $\alpha$  - изотермический коэффициент объемного расширения, а  $c_p$  - удельная теплоемкость при постоянном давлении.

Возмущения RS-состояния описываются переменными без черты, а реальные физические величины (давление, концентрация примеси, энтропия и скорость расплава) - суммами  $\bar{p} + p$ ,  $\bar{C} + C$ ,  $\bar{S} + S$  и  $V$ .

Далее будем использовать систему уравнений для земного ядра, которая была выведена в работе [8] при учете неупругого приближения  $\nabla \bar{\rho} V = 0$  ( $\bar{\rho}$  - плотность расплава) и описанных выше свойств. Эти уравнения в системе отсчета, вращающейся с постоянной угловой скоростью  $\Omega = \Omega e_z$  (здесь  $e_z$  и  $e_r$  - единичные векторы сферической системы координат), имеют следующий вид:

$$\nabla \bar{\rho} V = 0, \quad (2)$$

$$\iota \nabla^2 V = \frac{\partial V}{\partial t} + (V, \nabla) V + 2\Omega \times V + \nabla \left( \frac{p}{\bar{\rho}} \right) + \bar{T}' S + \bar{\mu}' C e_r, \quad (3)$$

$$\nabla \bar{\rho} D_l \nabla C = \bar{\rho} \left( \frac{\partial C}{\partial t} + (V, \nabla) C + \dot{\bar{C}} \right), \quad (4)$$

$$\nabla \bar{\rho} \bar{T} \kappa_s \nabla S = \bar{\rho} \bar{T} \left( \frac{\partial S}{\partial t} + (V, \nabla) S + \dot{\bar{S}} \right) + \frac{(r^2 \bar{q})'}{r^2} - \bar{\rho} \bar{\mu}' D_l \frac{\partial C}{\partial r}, \quad (5)$$

где слагаемое  $-\bar{T}'S - \bar{\mu}'C$  представляет собой направленное по радиусу ускорение силы Архимеда, а точка сверху обозначает временную производную.

Отток тепла  $(r^2 \bar{q})'/r^2$  в уравнении (5) вызван отклонением удельного тепла радиации (проводимости) от своего адиабатического значения

$$\bar{q}(r) = -c_p \kappa_l \bar{\rho} \bar{T}' > 0,$$

где  $\kappa_l$  - коэффициент температуропроводности расплава ядра Земли.

Производные

$$\dot{\bar{C}} = \frac{d\bar{C}}{dt} \geq 0, \dot{\bar{S}} = \frac{d\bar{S}}{dt} \leq 0$$

описывают долговременное поведение процессов охлаждения и перемешивания в уравнениях (4) и (5).

Вымораживание жидкого ядра во внутреннее дает следующие пограничные условия на границе  $r = r_{ICB}$  между твердым и жидким ядром Земли:

$$\dot{r}_{ICB} = \dot{R} = \frac{dR}{dt} = -\frac{\kappa_s \bar{\rho}_{ICB}}{\Delta S \rho_{SIC}} S'_{ICB} = -\frac{D_l \bar{\rho}_{ICB}}{\Delta C \rho_{SIC}} C'_{ICB}, r = r_{ICB}, \quad (6)$$

где  $\dot{R}$  - скорость роста земного ядра, а индексы ICB и SIC соответственно обозначают граничное значение величин при  $r = r_{ICB}$  и значение в твердом ядре Земли.

Медленная скорость роста внутреннего ядра Земли

$$\dot{R} = -r_{ICB} \left( \frac{f_s}{c_p} \frac{\partial S}{\partial t} + f_c \frac{\partial C}{\partial t} \right), \quad (7)$$

определяется числами вымораживания  $f_s$  и  $f_c$ , которые для земного ядра составляют  $f_s \approx 33$  и  $f_c \approx 70$  [8]. Скачки энтропии и концентрации в (6) при переходе через межфазную границу приблизительно оцениваются как  $\Delta S \approx 190$  Дж/(кг °K) и  $\Delta C \approx 0.065$  [11, 12]. Отметим, что в работе [14] использовались величины приблизительно в два раза меньшие, приведенных выше.

На границе жидкого ядра с внешней мантией  $r = r_{CMB}$  отсутствует поток вещества, а поток энтропии определяется через удельный тепловой поток  $q_s = q_o - \bar{q}_o$

$$\frac{\partial C}{\partial r} = 0, \frac{\partial S}{\partial r} = -\frac{q_s}{\bar{T} \bar{\rho} \kappa_s}, r = r_{CMB}. \quad (8)$$

Отметим, что неадиабатический тепловой поток  $q_s$  равен разнице между полным удельным тепловым потоком  $q_o$  и потоком, обусловленным тепловой проводимостью  $\bar{q}_o = \bar{q}(r_{CMB}) = -c_p \kappa_l \bar{\rho} \bar{T}'$ . В настоящий момент полный тепловой поток  $q_o$ , выходящий из ядра Земли, точно не известен. Он может быть как больше, так и меньше адиабатического потока, обусловленного проводимостью. Поэтому по порядку величины для  $q_s$  можно принять следующий интервал изменения:  $-10^{-2} \text{ Вт/м}^2 < q_s < 10^{-2} \text{ Вт/м}^2$  [7].

Радиально-симметричные решения системы уравнений (2)-(5) для покоящегося расплава будут описываться следующими зависимостями:

$$\frac{r^2 \bar{\rho} D_l C_r'}{r^2 \bar{\rho}} = \dot{C}_r + \dot{\bar{C}}, \quad (9)$$

$$\frac{r^2 \bar{\rho} \bar{T} \kappa_s S_r'}{r^2 \bar{\rho} \bar{T}} = \dot{S}_r + \dot{\bar{S}} + \frac{r^2 \bar{q}'}{r^2 \bar{\rho} \bar{T}} - \frac{\bar{\mu}' D_l C_r'}{\bar{T}}, \quad (10)$$

где нижний индекс  $r$  обозначает радиально-симметричные решения.

Уравнения (9) и (10) решаются с граничными условиями, следующими из выражений (6)-(8)

$$\frac{\bar{\rho}_{ICB} \kappa_s}{\rho_{SIC} \Delta S} \frac{S_r'}{r_{ICB}} = \frac{f_s}{c_p} \dot{S}_r + f_c \dot{C}_r = \frac{\bar{\rho}_{ICB} D_l}{\rho_{SIC} \Delta C} \frac{C_r'}{r_{ICB}}, r = r_{ICB}, \quad (11)$$

$$C'_r = 0, S'_r = -\frac{q_s}{\kappa_s \bar{\rho} \bar{T}}, r = r_{CMB}. \quad (12)$$

Следуя пока работам [11] и [12], считаем параметры  $\bar{\rho} = \rho$ ,  $\bar{T} = T$ ,  $D_l$  и  $\kappa_s$  постоянными. При этом, радиальные производные RS-величин оцениваются с помощью линейных радиальных зависимостей вида [11, 12]:

$$\bar{T}' = -T'' r, \bar{\mu}' = -\mu'' r, \bar{\rho}' = -\rho'' r, \bar{q} = -c_p \kappa_l \bar{\rho} \bar{T}' = \bar{q}_o r / r_{CMB}.$$

Решение задачи может быть найдено в виде

$$C_r = C_{r1}(r) + C_{r2}(t), S_r = S_{r1}(r) + S_{r2}(t),$$

где  $C_{r1}$ ,  $C_{r2}$ ,  $S_{r1}$  и  $S_{r2}$  - произвольные функции своих аргументов.

Подставляя эти выражения в (9)-(12), получаем решение задачи

$$C_r = C_{CMB} + \frac{\dot{C}_r + \dot{\bar{C}}}{3\kappa} \left( \frac{r^2}{2} + \frac{r_{CMB}^3}{r} - \frac{3r_{CMB}^2}{2} \right), \quad (13)$$

$$S_r = S_{CMB} + \frac{q_s}{T \rho \kappa} \left( \frac{r_{CMB}^2}{r} - r_{CMB} \right) + \frac{\dot{S}_r + \dot{\bar{S}} + 3\bar{q}_o / (r_{CMB} \rho T)}{3\kappa} \left( \frac{r^2}{2} + \frac{r_{CMB}^3}{r} - \frac{3r_{CMB}^2}{2} \right) + \quad (14)$$

$$+ \frac{\mu''}{6\kappa T} \left( \frac{r^4}{10} - r_{CMB}^3 r - \frac{3r_{CMB}^5}{5r} + \frac{3r_{CMB}^4}{2} \right),$$

$$\begin{aligned} \dot{C}_r + \dot{\bar{C}} = & \left\{ \frac{q_s}{\rho T} \frac{r_{CMB}^2}{r_{ICB}^2} - \frac{\bar{q}_o}{r_{CMB} \rho T} \left( r_{ICB} - \frac{r_{CMB}^3}{r_{ICB}^2} \right) - \frac{c_p}{3f_s} \left( f_c \dot{\bar{C}} + \frac{f_s}{c_p} \dot{\bar{S}} \right) \times \right. \\ & \left. \times \left( r_{ICB} - \frac{r_{CMB}^3}{r_{ICB}^2} \right) \right\} \left\{ \frac{\mu''}{30T} \left( 2r_{ICB}^3 - 5r_{CMB}^3 + \frac{3r_{CMB}^5}{r_{ICB}^2} \right) + \right. \end{aligned}$$

$$+ \left[ \frac{c_p}{3f_s} \left( \frac{\rho}{3\rho_{ICB}\Delta C r_{ICB}} \left( r_{ICB} - \frac{r_{CMB}^3}{r_{ICB}^2} \right) - f_c \right) - \frac{\Delta S}{3\Delta C} \left( r_{ICB} - \frac{r_{CMB}^3}{r_{ICB}^2} \right) \right]^{-1},$$

$$\dot{S}_r + \dot{\bar{S}} = \frac{c_p}{f_s} \dot{C}_r + \dot{\bar{C}} \left[ \frac{\rho}{3\rho_{ICB}\Delta C r_{ICB}} \left( r_{ICB} - \frac{r_{CMB}^3}{r_{ICB}^2} \right) - f_c \right] + \frac{c_p}{f_s} \left( f_c \dot{\bar{C}} + \frac{f_s}{c_p} \dot{\bar{S}} \right),$$

где, согласно работам [11, 12], ради простоты рассуждений принято  $D_l = \kappa_s = \kappa$ .

Граничные значения  $C_{CMB}$  и  $S_{CMB}$  на границе  $r = r_{CMB}$  жидкое ядро - мантия определяются с помощью следующих интегралов по объему  $V_c$  внешнего ядра [15]:

$$\int_{FOC} \bar{\rho} C_r dV_c = 4\pi\rho \int_{r_{ICB}}^{r_{CMB}} C_r r^2 dr = 0, \quad (15)$$

$$\int_{FOC} \bar{\rho} S_r dV_c = 4\pi\rho \int_{r_{ICB}}^{r_{CMB}} S_r r^2 dr = 0. \quad (16)$$

Условия (15) и (16) используются для определения граничных значений концентрации и энтропии в распределениях (13) и (14).

Из пограничного условия (6) скорость роста земного ядра можно представить в виде

$$\dot{R} = -\frac{\bar{\rho}_{ICB}}{3\rho_{SIC}\Delta C} \dot{C}_r + \dot{\bar{C}} \left( r_{ICB} - \frac{r_{CMB}^3}{r_{ICB}^2} \right). \quad (17)$$

Временные производные  $\dot{\bar{C}}$  и  $\dot{\bar{S}}$ , согласно работам [19, 11, 12], могут быть представлены в следующей форме:

$$\dot{\bar{C}} = \bar{C} \frac{\dot{M}_{SIC}}{M_o} = \bar{C} \frac{4\pi r_{ICB}^2 \rho_{SIC} \dot{R}}{M_o}, \quad (18)$$

$$\dot{\bar{S}} = \frac{4\pi}{TM_o} \left[ r_{ICB}^2 \rho_{SIC} \dot{R} L - \mu \bar{C} - r_{CMB}^2 (q_s + \bar{q}_o) \right], \quad (19)$$



где  $M_{SIC}$  и  $M_o$  - массы внутреннего и внешнего ядер, а  $L$  - внутреннее тепло, освобождающееся при вымораживании.

Из выражений (18) и (19) можно определить следующую комбинацию параметров:

$$f_c \dot{\bar{C}} + \frac{f_s}{c_p} \dot{\bar{S}} = \dot{R} \frac{4\pi r_{ICB}^2 \rho_{SIC}}{M_o} \left[ f_c \bar{C} + \frac{f_s}{c_p T} L - \mu \bar{C} \right] - \frac{f_s}{c_p} \frac{4\pi r_{CMB}^2}{TM_o} (q_s + \bar{q}_o). \quad (20)$$

Комбинируя выражения (17) и (20), находим скорость роста ядра Земли

$$\begin{aligned} \dot{R} = & - \left\{ \frac{\rho_{ICB}}{3\rho_{SIC}\Delta CT} \frac{1}{D_z} \left( r_{ICB} - \frac{r_{CMB}^3}{r_{ICB}^2} \right) \left[ q_s \left( \frac{r_{CMB}^2}{\rho_{ICB} r_{ICB}^2} + \frac{4\pi r_{CMB}^2}{3M_o} \left( r_{ICB} - \frac{r_{CMB}^3}{r_{ICB}^2} \right) \right) - \right. \right. \\ & \left. \left. - \bar{q}_o \left( \frac{1}{\rho_{ICB} r_{CMB}} - \frac{4\pi r_{CMB}^2}{3M_o} \right) \left( r_{ICB} - \frac{r_{CMB}^3}{r_{ICB}^2} \right) \right] \right\} \times \\ & \times \left\{ 1 - \frac{4\pi \rho_{ICB} r_{ICB}^2}{9\Delta CM_o} \frac{c_p}{f_s} \frac{1}{D_z} \left( r_{ICB} - \frac{r_{CMB}^3}{r_{ICB}^2} \right)^2 \left[ f_c \bar{C} + \frac{f_s}{c_p T} (L - \mu \bar{C}) \right] \right\}^{-1}, \\ D_z = & \frac{\mu''}{30T} \left( 2r_{ICB}^3 - 5r_{CMB}^3 + \frac{3r_{CMB}^5}{r_{ICB}^2} \right) + \\ & + \left[ \frac{c_p}{3f_s} \left[ \frac{\rho_{ICB}}{3\rho_{SIC}\Delta C r_{ICB}} \left( r_{ICB} - \frac{r_{CMB}^3}{r_{ICB}^2} \right) - f_c \right] - \frac{\Delta S}{3\Delta C} \right] \left( r_{ICB} - \frac{r_{CMB}^3}{r_{ICB}^2} \right). \end{aligned} \quad (21)$$

Зависимость (21) проиллюстрирована на рисунке 1. Характер поведения этой функции по сравнению с работами [123] и [124] полностью изменился после корректировки теоретических зависимостей, приведенных в настоящем разделе. В статьях [11, 12] скорость  $\dot{R}$  являлась убывающей функцией теплового потока  $q_s$  при каждом фиксированном значении  $\Delta C$  (см., например, рисунок 3 и его обсуждение в работе [11]). С учетом сделанных исправлений эта функция стала возрастающей. Другими словами, условие роста  $\dot{R} > 0$  выполняется, если полный тепловой поток  $q_o$ , выходящий из земного ядра, больше

адиабатического потока  $\bar{q}_o$ , обусловленного тепловой проводимостью, на некоторую величину  $\Delta q$ .

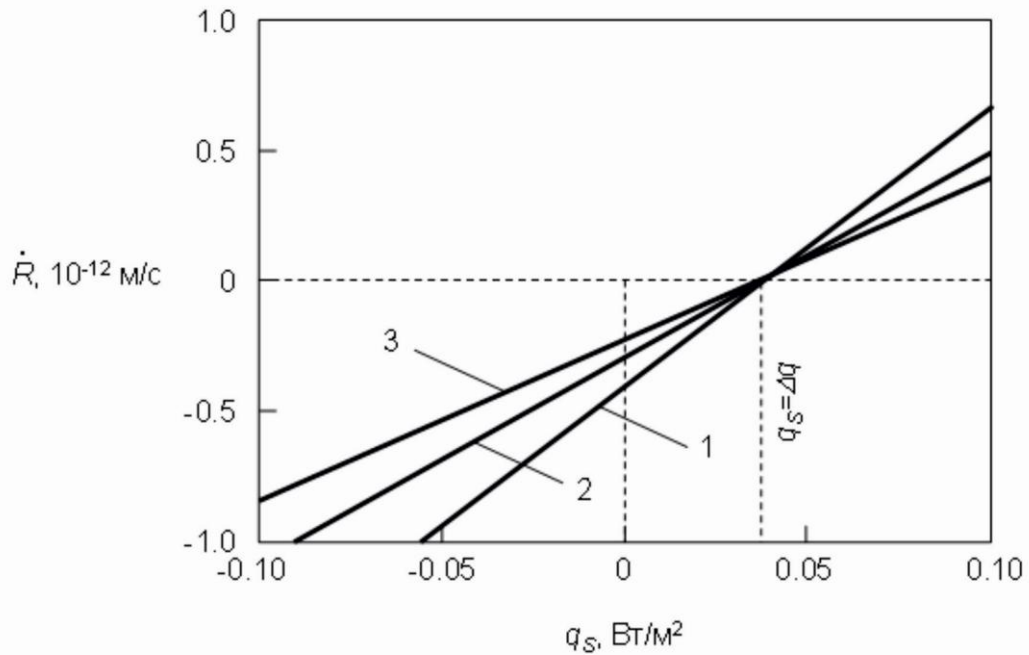


Рисунок 1 - Зависимость скорости роста ядра Земли  $\dot{R}$  от величины удельного неадиабатического теплового потока  $q_s$  при различных значениях скачка концентрации примеси  $\Delta C = 0.03$  (1),  $0.065$  (2),  $0.1$  (3). Все использованные расчетные параметры соответствуют значениям, приведенным в работах [11] и [12].

#### *Сферически-симметричные решения фронтальной модели с конвекцией.*

Рассмотрим далее влияние конвективных течений расплава на решения задачи. Теория конвективного теплопереноса в жидком ядре Земли может быть сформулирована с помощью отклонений от RS-состояния, как это было сделано выше для случая неподвижного расплава. Одна из часто используемых моделей, описывающих такое состояние, это модель PREM (Preliminary Reference Earth Model), предложенная в работе [16]. Модель PREM рассматривает ядро в адиабатическом состоянии при гидростатическом равновесии как сферически-симметричное тело. Такое RS-состояние поддерживается интенсивными конвективными течениями расплава в жидком ядре. Поэтому, как и ранее, концентрация примеси и энтропия в RS-состоянии описываются уравнениями (1).

Известно, что плотность жидкого ядра изменяется от его границы с мантией до границы с твердым ядром приблизительно на 20% [17]. Такое изменение плотности будет приводить к вариациям адиабатической температуры, гравитационного ускорения и

химического потенциала. Для учета таких зависимостей используем подход, развитый в работе [15], где пространственные изменения плотности в жидком ядре представлялись с помощью следующей квадратичной зависимости

$$\bar{\rho} = c_1(1 - c_2 r^2), \quad (22)$$

где параметры  $c_1$  и  $c_2$  определяются через известные значения внутреннего  $r_{ICB}$  и внешнего  $r_{CMB}$  радиусов, а соответствующие им плотности  $\bar{\rho}_{ICB}$  и  $\bar{\rho}_{CMB}$  принимаются равными значениям модели PREM (физические параметры модели PREM представлены в таблице 1). Опуская несложные преобразования запишем параметры  $c_1$  и  $c_2$  в виде

$$c_1 = \frac{\bar{\rho}_{ICB}}{1 - c_2 r_{ICB}^2}, \quad c_2 = \frac{\bar{\rho}_{ICB} - \bar{\rho}_{CMB}}{\bar{\rho}_{ICB} r_{CMB}^2 - \bar{\rho}_{CMB} r_{ICB}^2}.$$

Адиабатическая температура  $\bar{T}$  и тепловой поток  $\bar{q}$  в RS-состоянии записываются следующим образом:

$$\bar{T} = \bar{T}_{ICB} \left( \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_{ICB}} \right)^\gamma, \quad \bar{q} = -c_p \kappa_l \bar{\rho} \frac{d\bar{T}}{dr} = -c_p \kappa_l \bar{\rho} \bar{T}', \quad (3.23)$$

где  $\bar{T}_{ICB}$  - температура на границе твердого и жидкого ядра Земли в RS-состоянии, а  $\gamma$  - параметр Гюнейзена.

Интегрируя теперь гравитационное уравнение

$$(r^2 \bar{g})' = 4\pi G \bar{\rho} r^2,$$

получаем гравитационное ускорение  $\bar{g}(r)$  и потенциал  $\bar{U}_{gp}(r)$  в RS-состоянии

$$\bar{g} = \bar{U}_{gp}' = \frac{c_3}{r^2} + 4\pi G c_1 \left( \frac{r}{3} - \frac{c_2 r^3}{5} \right), \quad (24)$$

где  $c_3$  определяется через гравитационное ускорение  $\bar{g}_{ICB}$  на границе между твердым и жидким ядром в RS-состоянии ( $\bar{g}_{ICB} = GM_{SIC}/r_{ICB}^2$ ,  $G$  - гравитационная постоянная,  $M_{SIC}$  - масса твердого ядра Земли)

$$c_3 = r_{ICB}^2 \left( \bar{g}_{ICB} - 4\pi G c_1 \left( \frac{r_{ICB}}{3} - \frac{c_2 r_{ICB}^3}{5} \right) \right).$$

Таблица 3.1 - Теплофизические свойства в соответствии с моделью PREM.

Плотность $\bar{\rho}_{ICB}$	12166 кг м <sup>-3</sup>
Плотность $\bar{\rho}_{CMB}$	9903 кг м <sup>-3</sup>
Плотность, $\rho_{SIC}$	12764 кг м <sup>-3</sup>
Тепловой поток $q_s$	$1.4 \cdot 10^{-2}$ Вт м <sup>-2</sup>
Температура $\bar{T}_{ICB}$	5300 °K
Радиус $r_{ICB}$	$1222 \cdot 10^3$ м
Радиус $r_{CMB}$	$3480 \cdot 10^3$ м
Масса $M_{SIC}$	$9.839 \cdot 10^{22}$ кг
Коэффициент $D_l$	$2 \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$
Коэффициент $\kappa_s$	$2 \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$
Коэффициент $\kappa_l$	$5 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$
Параметр $\gamma$	1.35
Скачок концентрации $\Delta C$	0.065
Скачок энтропии $\Delta S$	190 Дж кг <sup>-1</sup> °K <sup>-1</sup>
Число вымораживания $f_c$	70
Число вымораживания $f_s$	33
Скорость изменения концентрации $\dot{C}$	$5 \cdot 10^{-20} \text{ с}^{-1}$
Скорость производства энтропии $\dot{S}$	$-10^{-16} \text{ Вт кг}^{-1} \text{ °K}^{-1}$
Теплоемкость $c_p$	840 Дж кг <sup>-1</sup> °K <sup>-1</sup>
Температурный градиент $g_l$	$-10.9 \cdot 10^{-4} \text{ °K м}^{-1}$
Температурный градиент $g_s$	$-1.7 \cdot 10^{-4} \text{ °K м}^{-1}$
Коэффициент теплопроводности $k_l$	$63 \text{ Дж м}^{-1} \text{ °K}^{-1} \text{ с}^{-1}$
Коэффициент теплопроводности $k_s$	$79 \text{ Дж м}^{-1} \text{ °K}^{-1} \text{ с}^{-1}$
Скрытая теплота $L_v$	$6.84 \cdot 10^9 \text{ Дж м}^{-3}$
Коэффициент распределения $k$	0.25
Наклон ликвидуса $m_p$	$9 \cdot 10^{-9} \text{ °K Па}^{-1}$
Ускорение свободного падения $\bar{g}_{ICB}$	$4.4 \text{ м с}^{-2}$
Концентрация $C_\infty$	0.01

Химический потенциал  $\bar{\mu}$  в RS-состоянии выражается через гравитационный потенциал  $\bar{U}_{gp}$  [8, 15] как

$$\bar{\mu} = c \bar{U}_{gp}(r) - \bar{U}_{gp}(r_{CMB}) , \quad (25)$$

где  $c = -0.6$  и  $\bar{\mu} = 0$  при  $r = r_{CMB}$  [15].

Давление в RS-состоянии  $\bar{p}$  определяется путем интегрирования гидростатического уравнения

$$\bar{p} = p_{ICB} - \int_{r_{ICB}}^r \bar{\rho} g dr,$$

где  $p(r = r_{ICB})$  соответствует модели PREM.

Процесс тепломассопереноса в жидком ядре Земли, как и ранее, описывается моделью (1)-(8). Будем искать сферически-симметричные решения конвективных уравнений (2)-(5), зависящие только от  $r$ . В этом случае уравнения (2), (4) и (5) записываются в виде

$$r^2 \bar{\rho} V_r' = 0, \quad (26)$$

$$\frac{D_t}{r^2 \bar{\rho}} r^2 \bar{\rho} C_r' = \dot{C}_r + \dot{\bar{C}} + V_r C_r', \quad (27)$$

$$\frac{\kappa_S}{r^2 \bar{\rho} \bar{T}} r^2 \bar{\rho} \bar{T} S_r' = \dot{S}_r + \dot{\bar{S}} + V_r S_r' + \frac{1}{r^2 \bar{\rho} \bar{T}} r^2 \bar{q}' - \frac{D_t}{\bar{T}} \bar{\mu} C_r', \quad (28)$$

Уравнение (3) требуется для определения возмущения давления  $p$ .

Уравнения (26)-(28) решаются с граничными условиями (6)-(8), выписанными выше. Интегрирование уравнения (26) дает

$$V_r = \frac{c_0}{r^2 \bar{\rho}(r)}, \quad (29)$$

где  $c_0$  - произвольная постоянная.

Сферически-симметричное решение является хорошим приближением конвективных уравнений в жидком ядре Земли в тех регионах, где расплав поднимается или опускается (см, например, рисунок 2 в статье [7]). Поэтому, вводя среднюю скорость жидкости в областях восходящего или нисходящего расплава

$$\bar{U} = \frac{1}{r_{\text{CMB}} - r_{\text{ICB}}} \int_{r_{\text{ICB}}}^{r_{\text{CMB}}} V_r(r) dr,$$

находим постоянную интегрирования

$$c_0 = \bar{U} (r_{\text{CMB}} - r_{\text{ICB}}) \left[ \int_{r_{\text{ICB}}}^{r_{\text{CMB}}} \frac{dr}{r^2 \bar{\rho}(r)} \right]^{-1}.$$

Используя метод интегрирования предыдущего раздела, находим решения уравнений (27) и (28)

$$C_r = C_{\text{CMB}} + \frac{A_c}{D_l} \int_{r_{\text{CMB}}}^r \frac{I_1(r) dr}{r^2 \bar{\rho}}, \quad (30)$$

$$S_r = S_{\text{CMB}} + \int_{r_{\text{CMB}}}^r \frac{B_c I_2 + I_3 - r_{\text{CMB}}^2 q_s / f_2}{\kappa_s r^2 \bar{\rho} \bar{T}} dr, \quad (31)$$

где

$$I_1(r) = f_1^{-1}(r) \int_{r_{\text{CMB}}}^r r^2 \bar{\rho}(r) f_1(r) dr, \quad I_2(r) = f_2^{-1}(r) \int_{r_{\text{CMB}}}^r r^2 \bar{\rho}(r) \bar{T}(r) f_2(r) dr,$$

$$I_3(r) = f_2^{-1}(r) \int_{r_{\text{CMB}}}^r H_c(r) r^2 \bar{\rho}(r) \bar{T}(r) f_2(r) dr,$$

$$H_c(r) = \frac{1}{r^2 \bar{\rho} \bar{T}} \left( 2 \bar{q} - \frac{D_l}{\bar{T}} \bar{\mu}' C_r' \right),$$

$$f_1(r) = \exp\left(-\int_{r_{\text{CMB}}}^r V_r dr/D_l\right), f_2(r) = \exp\left(-\int_{r_{\text{CMB}}}^r V_r dr/\kappa_s\right).$$

Подставляя теперь решения (30) и (31) в граничные условия (11), получаем коэффициенты  $A_c$  и  $B_c$

$$A_c = \frac{I_2(r_{\text{ICB}})[\dot{\bar{S}} + (c_p/f_s)f_c\dot{\bar{C}}] + I_4(r_{\text{ICB}}) - q_s r_{\text{CMB}}^2/f_2(r_{\text{ICB}})}{I_5(r_{\text{ICB}}) + \Delta S I_1(r_{\text{ICB}})\bar{T}(r_{\text{ICB}})/\Delta C - M_c},$$

$$M_c = \frac{c_p I_2(r_{\text{ICB}})}{f_s} \left[ \frac{I_1(r_{\text{ICB}})}{\Delta C r_{\text{ICB}}^3 \rho_{\text{SIC}}} - f_c \right],$$

$$B_c = \dot{\bar{S}} + \frac{c_p}{f_s} f_c \dot{\bar{C}} + \frac{A_c c_p}{f_s} \left[ \frac{I_1(r_{\text{ICB}})}{\Delta C r_{\text{ICB}}^3 \rho_{\text{SIC}}} - f_c \right],$$

$$I_4(r) = f_2^{-1}(r) \int_{r_{\text{CMB}}}^r \mathfrak{C}^2 \bar{q} \rhd f_2(r) dr, I_5(r) = f_2^{-1}(r) \int_{r_{\text{CMB}}}^r \bar{\mu}' I_1(r) f_2(r) dr.$$

Граничные значения  $\xi_{\text{CMB}}$  и  $S_{\text{CMB}}$  определяются интегралами (15) и (16) по объему жидкого ядра (FOC). Выполняя необходимые вычисления, имеем

$$C_{\text{CMB}} = \frac{A_c}{D_l} \int_{r_{\text{ICB}}}^{r_{\text{CMB}}} \frac{I_1(r) F_c(r) dr}{r^2 \bar{\rho}(r) F_c(r_{\text{CMB}})}, F_c(r) = \frac{r^3 - r_{\text{ICB}}^3}{3} - \frac{c_2(r^5 - r_{\text{ICB}}^5)}{5},$$

$$S_{\text{CMB}} = \int_{r_{\text{ICB}}}^{r_{\text{CMB}}} \frac{B_c I_2(r) + I_3(r) - r_{\text{CMB}}^2 q_s / f_2(r)}{\kappa_s r^2 \bar{\rho}(r) \bar{T}(r)} \frac{F_c(r)}{F_c(r_{\text{CMB}})} dr.$$

Теперь возмущение давления  $p$  легко находится путем интегрирования уравнения (3).

Специально отметим, что выражение (29) представляет собой приближение для радиальной скорости течения расплава в тех регионах жидкого ядра, где жидкость поднимается или опускается (за исключением других регионов, где горизонтальные течения становятся сравнимы по порядку величины с вертикальными). Хотя в этой главе решения

полной гидродинамической задачи не определяются, распределения (30) и (31) дают адекватное физическое поведение построенных решений около границы с мантией. Это объясняется тем обстоятельством, что концентрация примеси  $C_r$  и энтропия  $S_r$  зависят от  $V_r$  с помощью функций  $f_1(r)$  и  $f_2(r)$ , которые представляют собой исчезающие интегралы при  $r = r_{\text{СМВ}}$ . Этот результат следует из уравнений (27) и (28), проинтегрированных для произвольной функции  $V_r(r)$ . Аналитические решения задачи (27) и (28) описывают решение, как в конвективном случае, так и в случае неподвижной среды ( $\bar{U} = 0$ ), обсуждаемом в предыдущем разделе. Также отметим, что решения (29)-(31) при  $\bar{U} = 0$  имеют предельный переход к теории предыдущего раздела.

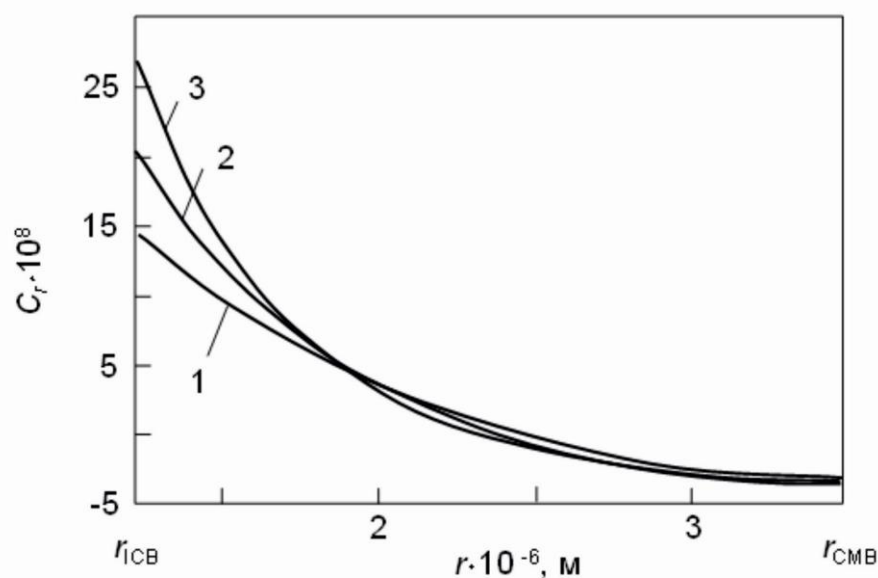


Рисунок 2 - Радиальная зависимость сферически-симметричных возмущений концентрации примеси  $C_r$  (относительно RS-состояния) при различных средних скоростях  $\bar{U} = 10^{-6}$  м/с (1),  $\bar{U} = 0$  м/с (2),  $\bar{U} = -10^{-6}$  м/с (3).

Рисунки 2 и 3 показывают сферически-симметричные части  $C$  и  $S$  (расчетные параметры приведены в таблице 1). Увеличение конвективной скорости  $\bar{U}$  приводит к уменьшению концентрации примеси и удельной энтропии. В отсутствие конвекции ( $\bar{U} = 0$ ) величина  $C_r$  возрастает около границы с твердым ядром благодаря эффекту вытеснения примеси растущей твердой фазой. В тех местах, где жидкость поднимается ( $\bar{U} > 0$ ), конвективные течения уменьшают концентрацию примеси у границы с твердым ядром, а там, где жидкость опускается ( $\bar{U} < 0$ ),  $C_r$  возрастает около этой межфазной границы



благодаря конвективному притоку примеси из объема жидкого ядра. Подобное влияние конвективных течений на распределение возмущений энтропии  $S_r$  приведено на рисунке 3.

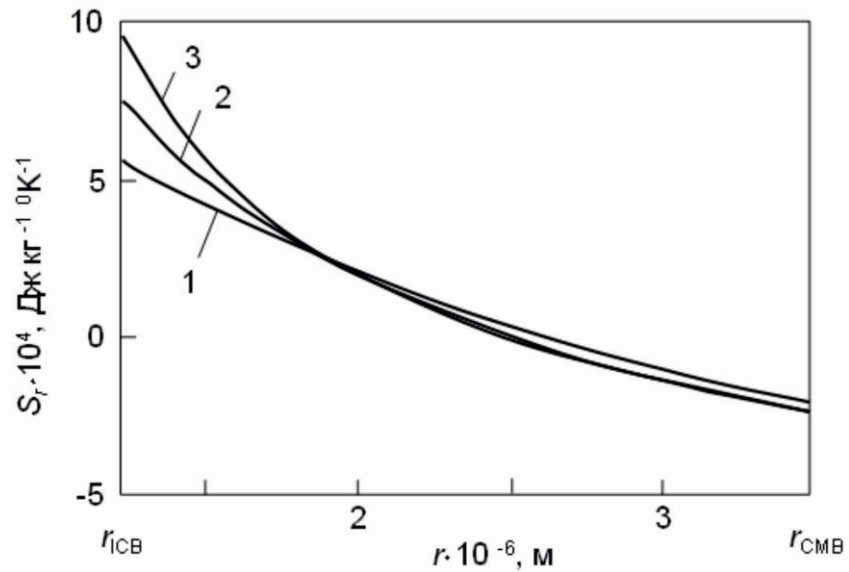


Рисунок 3 - Радиальная зависимость сферически-симметричных возмущений энтропии  $S_r$  (относительно RS-состояния) при различных средних скоростях  $\bar{U} = 10^{-6}$  м/с (1),  $\bar{U} = 0$  м/с (2),  $\bar{U} = -10^{-6}$  м/с (3).

Представляется важным отметить, что сферически-симметричные решения, показанные на рисунках 2 и 3, лишь не на много отличаются от численных решений трехмерной магнитогидродинамической модели работ [7] и [15] несмотря на то обстоятельство, что энергия магнитного поля (учтенная в работах [7] и [15] и неучтенная в данном изложении) на несколько порядков больше энергии поля скорости. Поэтому приведенное решение должно в себе содержать не только источники немагнитной конвекции, но и источники магнитогидродинамического динамо планеты. Этот вывод также подтверждается магнитогидродинамическими оценками, приведенными в работе [18]. В этой статье показано, что характерные амплитуды магнитного поля создаются осесимметричной частью магнитогидродинамических уравнений. Это обстоятельство позволяет использовать найденные аналитические решения в качестве тестовых решений для численных расчетов более общей трехмерной модели уравнений геодинамо.

# **1. Определение основных параметров системы, дестабилизирующих процесс затвердевания и выявление роли этих параметров на ширину областей неустойчивости**

Выразим теперь скорость роста внутреннего ядра  $\dot{R}$  из граничного условия (6). Подстановка  $C_r$  из (30) в (6) дает

$$\dot{R} = -\frac{A_c I_1(r_{ICB})}{\Delta C \rho_{SiC} r_{ICB}^2}. \quad (32)$$

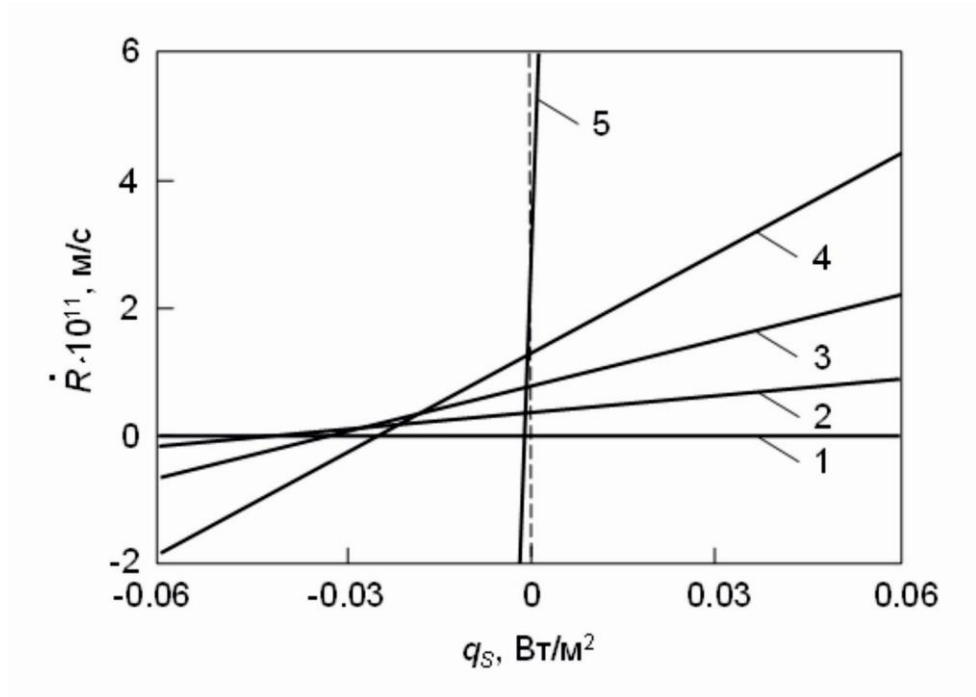


Рисунок 4 - Скорость роста ядра Земли в зависимости от теплового потока на границе с мантией при различных значениях средней скорости конвективного течения жидкости  $\bar{U} = 10^{-4}$  м/с (1),  $\bar{U} = 10^{-6}$  м/с (2),  $\bar{U} = 0$  м/с (3),  $\bar{U} = -10^{-6}$  м/с (4),  $\bar{U} = -10^{-4}$  м/с (5); зависимость 1 находится выше нуля.

Рисунок 4 показывает, что увеличение средней скорости  $\bar{U}$  ведет к уменьшению теплового потока  $q_s$  в критической точке  $q_s = q_c$ , ответственной за положительность скорости роста ядра  $\dot{R} > 0$  при  $q_s > q_c$  ( $q_c = q_s$ , когда  $\dot{R} = 0$ ). Другими словами, условие роста  $\dot{R} > 0$  не удовлетворяется, когда  $\bar{q} > q - q_c$ . Когда же общий тепловой поток  $q$  больше, чем  $\bar{q} + q_c$ , представленное конвективное решение задачи является достаточным для описания процесса роста ядра. Специально отметим, что критический поток  $q_c < 0$  для всех значений скорости расплава  $\bar{U}$ , проиллюстрированных на рисунке 4. Принимая во внимание

предельную оценку  $10^{-4}$  м/с для верхнего предела модуля скорости  $|\bar{U}|$  [19], заключаем, что  $q_C < 0$  для всевозможных конвективных течений жидкости во внешнем ядре. Это означает, что общий тепловой поток  $q$  больше, чем адиабатический поток  $\bar{q}$ , когда  $q_S > 0$  и  $q_C + \bar{q} < q < \bar{q}$ , когда  $q_C < q_S < 0$ . Легко заметить, что случай опускающейся жидкости (при скорости  $-10^{-4}$  м/с) наиболее вероятно будет описываться неравенством  $q > \bar{q}$ . Противоположный случай, когда жидкость поднимается (при скорости  $10^{-4}$  м/с), соответствует достаточно медленным скоростям  $\dot{R}$  благодаря небольшим значениям концентрационного переохлаждения около границы с твердым ядром.

Отметим, что скорость роста ядра  $\dot{R}$  практически линейно зависит от теплового потока  $q_S$  при различных скоростях жидкости. Также подчеркнем, что скорость роста  $\dot{R}$  увеличивается с уменьшением  $\bar{U} < 0$ . Это вызвано тем обстоятельством, что поток примеси, направленный к твердому ядру, увеличивает концентрационное переохлаждение у межфазной границы. Этот вывод находится в соответствии с анализом морфологической устойчивости ядра Земли [20, 21], где показана возможность существования двух разных сценариев затвердевания: концентрационное переохлаждение и морфологическая устойчивость и концентрационное переохлаждение и морфологическая неустойчивость, которые описываются различными теориями области фазового перехода [20-27]. Отметим еще, что если полный тепловой поток больше, чем адиабатический поток у границы  $r = r_{ICB}$  и если полный тепловой поток меньше, чем адиабатический поток у границы  $r = r_{CMB}$  [17], тогда точка, в которой эти потоки совпадают движется по направлению к границе с мантией при уменьшении конвективной скорости  $\bar{U} : -10^{-4}$  м/с ( $q_C \rightarrow -0$ , рисунок 4).

Важным обстоятельством является то, что скорость роста ядра больше в тех частях, где расплав опускается (рисунок 4). Это вызвано тем, что эти части поверхности ядра имеют более низкую температуру благодаря притоку холодной жидкости, идущей из недр жидкого ядра благодаря механизму конвекции. Те части поверхности ядра, где жидкость поднимается, представляют собой более горячие зоны, благодаря механизму конвективного теплоотвода от твердого ядра к мантии. В результате, скорость роста твердой фазы в этих частях ядра, вычисленная на основе фронтальной модели, меньше, чем скорость в регионах охлаждения (где расплав опускается к ядру). Эта разница скоростей является причиной морфологической неустойчивости межфазной границы и дендритного роста в метастабильных регионах расплава в более холодных частях ядра Земли. Такая физическая картина процесса кристаллизации характерна не только для земного ядра, но и для процессов

выращивания кристаллов, замерзания морской воды и затвердевания расплавов в металлургии [28-31].

Предположим, что примесь первоначально распределена однородно в расплаве около границы с твердым ядром, а движение фронта кристаллизации с постоянной скоростью  $u_s$  обеспечивают соответствующие температурные градиенты. Поскольку коэффициент распределения примеси  $k$  меньше единицы, движение межфазной границы приводит к вытеснению примеси в расплав, которая впоследствии перераспределяется благодаря механизмам диффузии и конвекции. Возрастание концентрации примеси перед фронтом приводит к уменьшению температуры фазового перехода, которая возрастает с увеличением расстояния от межфазной границы. Указанные процессы приводят к установлению квазистационарных распределений концентрации примеси  $C$ , температуры фазового перехода  $T_p$  и температуры расплава  $T$ .

Если температурный градиент  $G_l$  в расплаве на фронте затвердевания меньше (или равен) градиента  $G_{pt}$  температуры фазового перехода, тогда перед фронтом образуется область концентрационного переохлаждения. В условиях кристаллизации земного ядра температура фазового перехода зависит от концентрации примеси  $\Xi = \bar{C} + C$  и от давления  $P = \bar{p} + p$ . Обозначая наклоны поверхности ликвидус через  $m_c = (\partial T_p / \partial \Xi)_p < 0$  и  $m_p = (\partial T_p / \partial P)_\Xi > 0$  (последний коэффициент также называют наклоном Клайперона), получаем критерий концентрационного переохлаждения

$$G_l \leq G_{pt} = m_p G_p + m_c G_c, \quad (33)$$

где  $G_p$  и  $G_c$  обозначают градиенты давления и концентрации.

Из термодинамики известно, что дифференциал энтропии в жидком ядре Земли можно представить в виде [8, 17]

$$d(\bar{S} + S) = \frac{c_p}{T} dT - \frac{\alpha_T}{\rho} dP + \frac{h^c}{T} d\Xi,$$

где  $\alpha_T$  - коэффициент теплового расширения, а  $h^c$  - теплота реакции.

Деля это уравнение на  $dr$  и учитывая, что  $\nabla \bar{S} = \nabla \bar{C} = 0$  в RS-состоянии, получаем следующее выражение на границе фазового перехода (при  $r = r_{ICB}$ ):

$$\bar{g}_l = \frac{\alpha_T \bar{T}_{ICB}}{c_p \bar{\rho}_{ICB}} \bar{g}_P = m_P \bar{g}_P, \quad (34)$$

$$g_l - m_P g_P - m_C g_C = \frac{\bar{T}_{ICB}}{c_p} g_S < 0, \quad (35)$$

где  $m_C = -h^c/c_p$ , а все градиенты представлены в виде сумм RS-градиентов (обозначены чертой сверху) и возмущений в виде

$$\nabla T = G_l = \bar{g}_l + g_l, \nabla P = G_P = \bar{g}_P + g_P, \nabla \Xi = G_C = \nabla \bar{C} + g_C, \nabla S = g_S.$$

Здесь  $\bar{g}_l$  и  $\bar{g}_P$  обозначают градиенты температуры расплава и давления в RS-состоянии, а  $g_l$ ,  $g_P$  и  $g_S$  - возмущения градиентов температуры расплава, давления и энтропии. Выражение (34) показывает, что неравенство (33) становится равенством, т.е., что адиабатическое RS-состояние описывает фронтальный сценарий затвердевания с минимальным (нулевым) переохлаждением. Далее подставляя (34) в (33) запишем критерий концентрационного переохлаждения для возмущений

$$g_l - m_P g_P - m_C g_C \leq 0. \quad (36)$$

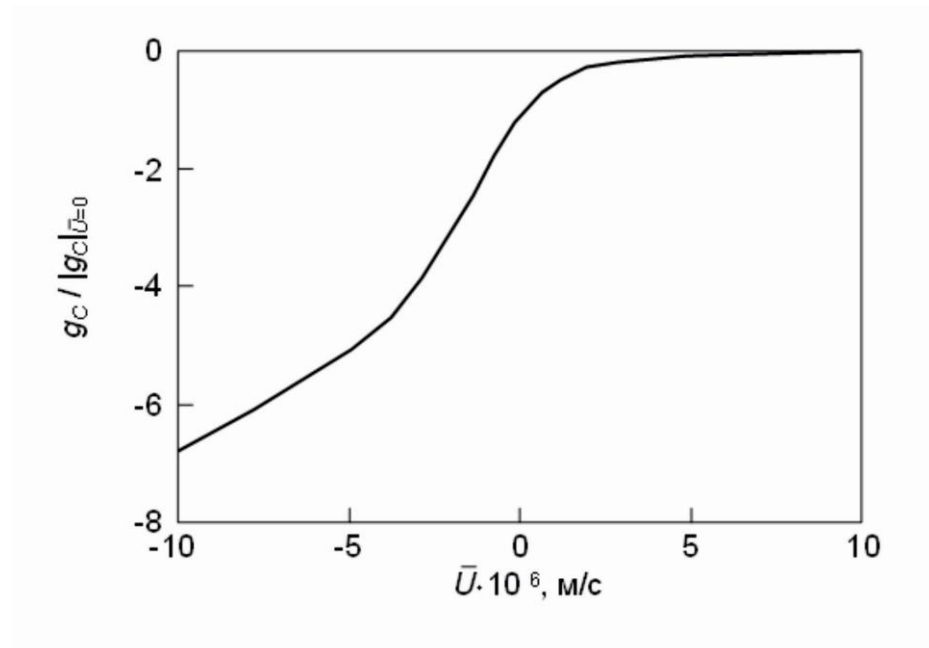


Рисунок 5 - Относительный градиент концентрации примеси на границе с твердым ядром в зависимости от средней скорости жидкости.

Неравенство (36) всегда выполняется для найденных выше сферически-симметричных решений, поскольку  $\bar{T}_{ICB} g_s / c_p = \bar{T}_{ICB} S'_r / c_p < 0$  при  $r = r_{ICB}$  (см. соотношение (35) и рисунок 3). Другими словами, рассматриваемая неэластичная фронтальная модель показывает, что расплав является всегда переохлажденным около границы с твердым ядром Земли. Этот вывод справедлив даже в безконвективном случае. При этом, увеличение конвективной скорости, направленной к твердому ядру, увеличивает концентрационное переохлаждение в соответствии с решениями, показанными на рисунках 3 и 5. Причина состоит в том, что концентрация примеси около границы фазового превращения претерпевает лишь незначительное увеличение благодаря притоку из недр жидкого ядра за счет опускающейся холодной жидкости, когда  $\bar{U} < 0$ . В противоположном случае, когда  $\bar{U} > 0$ , в регионах восходящей жидкости температура более высокая, вследствие теплоотвода от более горячего твердого ядра в недра более холодного жидкого ядра.

Поскольку расплав около границы с твердым ядром всегда переохлажден, принципиально возможны два сценария процесса кристаллизации "концентрационное переохлаждение и морфологическая устойчивость" и "концентрационное переохлаждение и морфологическая неустойчивость" [20, 21] (анализ морфологической устойчивости ядра излагается далее). При этом, оба сценария контролируются конвективными течениями расплава у межфазной границы. Первый из этих сценариев описывается либо моделью двухфазной зоны с нуклирующими частицами твердой фазы в двухфазной зоне (при сохранении границей твердого ядра локально плоской формы), либо просто фронтальной моделью. Второй сценарий затвердевания описывается моделью области фазового перехода, заполненной дендритоподобными структурами [20, 21]. При этом, дендриты могут простираться далеко в глубь жидкого ядра Земли [5].

Также важным представляется отметить следующее. Только первый из приведенных выше сценариев процесса может быть описан с помощью неэластичной модели при небольших переохлаждениях. Когда же переохлаждение достаточно велико, неэластичная модель (с соответствующими ей граничными условиями) не может быть использована для описания процесса тепломассопереноса в области фазового перехода ядра Земли. Этот подход должен быть видоизменен, чтобы учесть формирование двухфазного региона у границы твердого ядра. Другими словами, более вероятный сценарий процесса "концентрационное переохлаждение и морфологическая неустойчивость" должен описываться с помощью теории двухфазной зоны около границы с твердым ядром и, например, неэластичной теорией в остальном регионе расплава жидкого ядра с новыми граничными условиями на межфазной поверхности двухфазная область - расплав. Такая

более общая модель приведет к модификации численных расчетов магнитной гидродинамики и тепломассопереноса, ранее проведенных в работах [7, 15].

Таким образом, основными параметрами, дестабилизирующими процесс затвердевания в условиях действия концентрационного переохлаждения являются: скорость натекающего на ядро Земли расплава, температурные градиенты и тепловые потоки, а также теплофизические параметры земного ядра, по значениям которых существует разброс данных в современной литературе. При этом, ширина области неустойчивости зависит от плоскости параметров системы, в которых строится кривая нейтральной устойчивости процесса. Ниже будут приведены кривые нейтральной устойчивости процесса и выявлена количественная роль основных параметров системы на протяженность области неустойчивости.

## **2. Нахождение критерия динамической неустойчивости затвердевания ядра Земли для самых опасных (быстрорастущих) возмущений, соответствующих нулевому волновому числу**

Для исследования поставленной цели необходимо провести анализ морфологической устойчивости земного ядра для произвольных значений длины волны и волнового числа возмущений, а затем устремить волновое число к нулю.

Исследуем в этом разделе условия неустойчивого затвердевания земного ядра, приводящие к росту дендритов и возникновению области фазового перехода. Для этого рассмотрим сначала процесс направленного затвердевания с плоской межфазной границей. Твердая фаза и расплав соответственно занимают области  $z < 0$  и  $z > 0$ . Уравнения конвективного переноса тепла и массы в обеих фазах имеют вид

$$\frac{\partial T_l}{\partial t} - u_s \frac{\partial T_l}{\partial z} + V \cdot \nabla T_l = \kappa_l \nabla^2 T_l, z > 0, \quad (37)$$

$$\frac{\partial C_l}{\partial t} - u_s \frac{\partial C_l}{\partial z} + V \cdot \nabla C_l = D_l \nabla^2 C_l, z > 0, \quad (38)$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} - u_s \frac{\partial T_s}{\partial z} = \kappa_s \nabla^2 T_s, z < 0, \quad (39)$$

где  $t$  - время процесса  $V$  - скорость расплава,  $T_s$  - температура в твердом ядре,  $T_l$  и  $C_l$  - температура и концентрация примеси в жидком ядре.

Температура на границе фазового перехода (при  $z=0$ ) определяется соотношением Гиббса-Томсона

$$T_l = T_s = T_* + \Gamma H + m_p G_p h' + m_c C_l, \quad (40)$$

где  $\Gamma = T_* \gamma_i / L_v$  - коэффициент Гиббса ( $\gamma_i$  - поверхностная энергия,  $L_v$  - скрытая теплота фазового перехода). В рассматриваемой здесь линейной теории  $H \approx \nabla^2 h'$  ( $h'(x, y, t)$  представляет собой морфологические возмущения локально плоской межфазной поверхности). Далее будем считать, что  $G_p = \rho_l \bar{g}_{ICB}$ .

Условия баланса тепла и массы на фронте представим в виде

$$L_v v_n = n \cdot (k_s \nabla T_s - k_l \nabla T_l), \quad z = 0, \quad (41)$$

$$(k-1)C_l v_n = D_l n \cdot \nabla C_l, \quad z = 0, \quad (42)$$

где  $n$  - вектор нормали к поверхности, ориентированный в сторону расплава, а  $v_n \approx u_s + \partial h' / \partial t$ .

Квазистационарные решения модели (37)-(42) определяют режим затвердевания плоского фронта с постоянной скоростью  $u_s$ . Граничные условия (41) и (42) позволяют определить градиенты концентрации примеси и температуры в твердом ядре на межфазной поверхности

$$G_c = \frac{C_0(k-1)u_s}{D_l}, \quad G_s = \frac{L_v u_s}{k_s} + \frac{k_l}{k_s} G_l, \quad z = 0,$$

Принимая во внимание, что  $V=0$  при  $z=0$ , из уравнений (37)-(39) находим нижеследующие вторые производные в квазистационарном режиме, необходимые для дальнейшего анализа морфологической устойчивости:

$$\frac{d^2 C_l}{dz^2} = -\frac{u_s^2(k-1)C_0}{D_l^2}, \quad z = 0,$$



$$\frac{d^2 T_l}{dz^2} = -\frac{u_s G_l}{\kappa_l}, \quad \frac{d^2 T_s}{dz^2} = -\frac{u_s G_s}{\kappa_s}, \quad z = 0.$$

Наложим морфологические возмущения на локально плоский фронт затвердевания в виде  $h' = h_1 \exp(\omega t + ik_x x + ik_y y)$ . Эти возмущения вызывают возмущения концентрации примеси ( $C_l'$ ) и температур в жидкой ( $T_l'$ ) и твердой ( $T_s'$ ) фазах:  $C_l' = C_{l1} \exp(\omega t + ik_x x + ik_y y + \beta z)$ ,  $T_l' = T_{l1} \exp(\omega t + ik_x x + ik_y y + \beta_l z)$  и  $T_s' = T_{s1} \exp(\omega t + ik_x x + ik_y y + \beta_s z)$ . Здесь  $\omega$  - скорость роста возмущений,  $k_x$  и  $k_y$  - волновые числа в направлениях  $x$  и  $y$ . Далее раскладывая граничные условия (40)-(42) в ряды в окрестности  $z = 0$ , находим следующие выражения для амплитуд возмущений  $h_1$ ,  $C_{l1}$ ,  $T_{l1}$  и  $T_{s1}$  при  $z = 0$ :

$$C_{l1} \beta + (1-k)u_s / D_l = h_1 k u_s G_C + (k-1)C_0 \omega / D_l, \quad (43)$$

$$T_{s1} - T_{l1} + (G_s - G_l)h_1 = 0, \quad (44)$$

$$k_s \beta_s T_{s1} - k_l \beta_l T_{l1} + u_s k_l G_l / \kappa_l - u_s k_s G_s / \kappa_s - L_v \omega h_1 = 0, \quad (45)$$

$$(\Gamma k_h^2 - m_p G_p - m_c G_C + G_l)h_1 + T_{l1} - m_c C_{l1} = 0, \quad k_h = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}. \quad (46)$$

Для нахождения коэффициентов  $\beta$ ,  $\beta_l$  и  $\beta_s$  перепишем уравнения (37)-(39) для возмущений

$$C_{l1} \omega - u_s \beta - D_l (\beta^2 - k_h^2) + U_z G_C h_1 = 0, \quad (47)$$

$$T_{l1} \omega - u_s \beta_l - \kappa_l (\beta_l^2 - k_h^2) + U_z G_l h_1 = 0, \quad (48)$$

$$\beta_s = -\frac{u_s}{2\kappa_s} \left( 1 - \sqrt{1 + \frac{4(k_h^2 \kappa_s^2 + \omega \kappa_s)}{u_s^2}} \right). \quad (49)$$

Комбинируя теперь выражения (43) и (46)-(48), получаем

$$\beta = -\frac{1}{2} \left( \frac{u_s}{D_l} - \sigma \right) \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{4(\omega + D_l k_h^2 + \sigma(1-k)u_s)}{D_l(u_s/D_l - \sigma)^2}} \right), \quad (50)$$

$$\beta_l = -\frac{u_s}{2\kappa_l} \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{4B_l}{u_s^2}} \right), \quad (51)$$

где

$$\sigma = \frac{U_z G_C}{ku_s G_C + (k-1)C_0 \omega}, U_z = - \left( \frac{\partial V_z}{\partial z} \right)_{z=0}, B_l = \omega \kappa_l + U_z G_l \kappa_l / B + k_h^2 \kappa_l^2,$$

$$B = \frac{m_C(ku_s G_C + (k-1)C_0 \omega)}{\beta D_l + (1-k)u_s} - \Gamma k_h^2 + m_P G_P + m_C G_C - G_l,$$

а  $V_z$  представляет собой невозмущенную  $z$ -компоненту скорости жидкости в направлении затвердевания. Отметим, что в отсутствие конвективных течений, когда  $U_z = 0$ , выражения (49)-(51) переходят в соответствующие формулы работы [32].

Далее исключая амплитуды возмущений из системы (43)-(46), получаем нелинейное дисперсионное уравнение

$$\omega = F(\omega, k_h), \quad (52)$$

где

$$F = \left( m_C m_C G_C - \alpha_l G_l - \alpha_s G_s + m_P G_P - \Gamma k_h^2 \right) \times \left( \frac{L_V}{k_s \beta_s - k_l \beta_l} - \frac{m_C G_C D_l / u_s^2}{\beta D_l / u_s + 1 - k} \right)^{-1},$$

$$\alpha_l = k_l \frac{\beta_l + u_s / \kappa_l}{k_l \beta_l - k_s \beta_s}, \alpha_s = -k_s \frac{\beta_s + u_s / \kappa_s}{k_l \beta_l - k_s \beta_s}, \alpha_C = \frac{\beta + u_s / D_l}{\beta + (1-k)u_s / D_l}.$$

Если скорость растяжения  $U_z = 0$ , выражение (52) преобразуется в дисперсионный закон для неподвижного расплава, найденный в статье [32] (соотношение (18) в [32]). Таким образом, уравнение (52) расширяет рассматриваемую теорию морфологической неустойчивости на случай конвекции в расплаве. Отметим также, что новый критерий (52) содержит в себе все ранее известные критерии морфологической устойчивости [32-35].

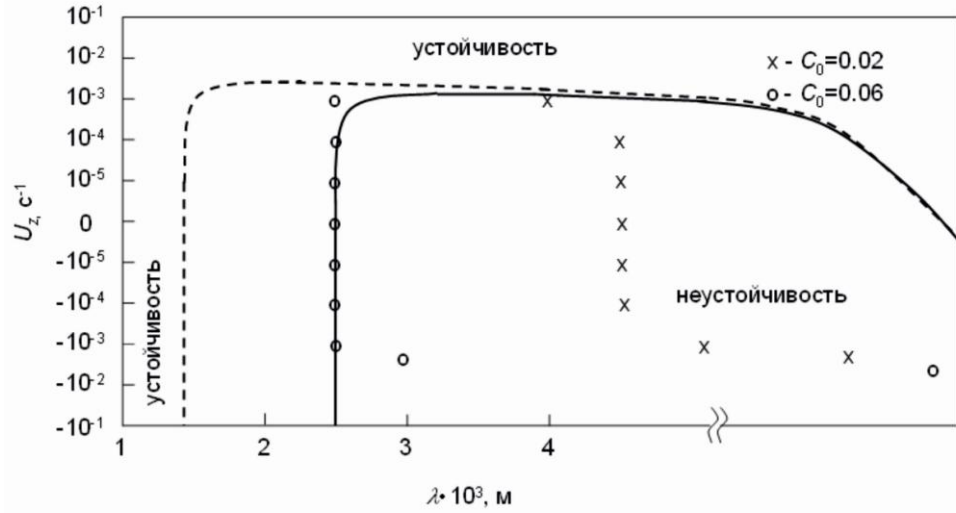


Рисунок 6 - Кривые нейтральной устойчивости для различных допустимых значений концентраций примеси  $C_0$ : ( $C_0 = 0.02$  - сплошные линии,  $C_0 = 0.06$  - штриховые линии). Символы соответствуют длинам волн возмущений  $\lambda_m$  с максимальными частотами (см. рисунок 7). Критерий концентрационного переохлаждения (33) выполняется в областях устойчивости ( $\omega < 0$ ) и неустойчивости ( $\omega > 0$ ).

Оценим абсолютное значение скорости растяжения  $|U_z|$  как  $\bar{V}_z/\bar{z}$ , где  $\bar{V}_z$  и  $\bar{z}$  - характерные значения скорости жидкости и расстояния. Рассматриваемая теория основывается на предположении, что конвективная скорость  $V_z$  больше, чем скорость роста земного ядра  $u_s$ , которая по всем существующим оценкам больше, чем  $\bar{V}_z : 10^{-13}$  м/с. С другой стороны, ее верхний предел составляет  $\bar{V}_z : 10^{-4}$  м/с [19]. Длина волны, соответствующая максимальным значениям частоты возмущений без конвекции, составляет  $\lambda_m = \bar{z} : 10^{-3}$  м [136, 137], в то время, как неровности границы земного ядра проявляются на сейсмическом масштабе  $\bar{z} : 10^3$  м [36]. Таким образом, получаем следующую оценку для скорости растяжения:

$$|U_z| : \frac{10^{-13} - 10^{-4}}{10^{-3} - 10^3} \text{ с}^{-1} : (10^{-16} - 10^{-1}) \text{ с}^{-1},$$

т.е.  $-10^{-1} < U_z < 10^{-1} \text{ с}^{-1}$ .

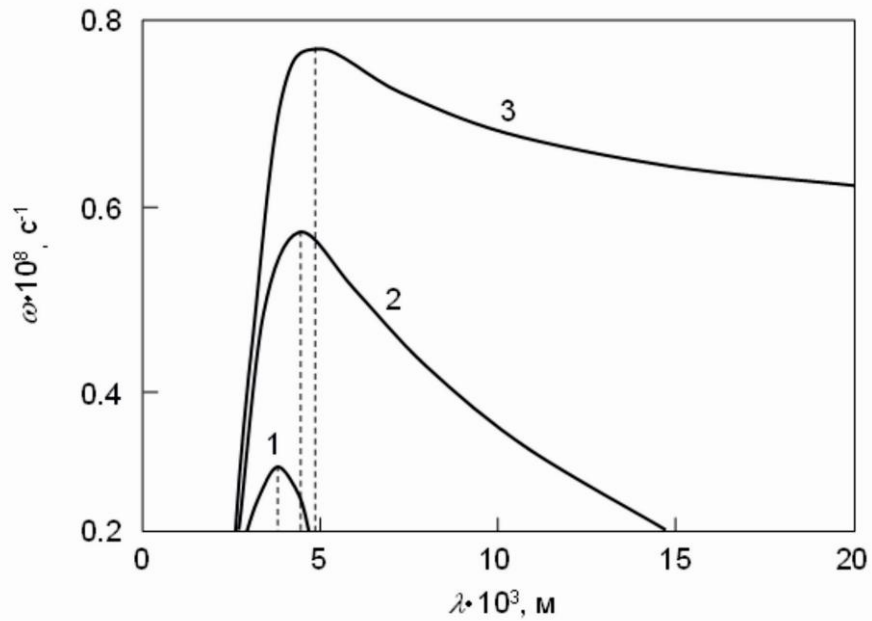


Рисунок 7 - Скорость роста возмущений в зависимости от длины волны  $\lambda$  при различных скоростях растяжения: (1) -  $U_z = 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ , (2) -  $U_z = 0 \text{ с}^{-1}$  и (3) -  $U_z = -10^{-3} \text{ с}^{-1}$ . Вертикальные линии показывают длины волн  $\lambda_m$  с максимальными частотами.

Кривая нейтральной устойчивости ( $\omega = 0$ ), полученная из выражения (52) для различных длин волн возмущений показана на рисунке 6 (расчетные параметры системы приведены в таблице 2). Две кривые, проиллюстрированные при  $C_0 = 0.02$  и  $C_0 = 0.06$  соответствуют оценке  $C_0 : 0.05$ , полученной в работе [19]. Легко увидеть, что длины волн  $\lambda_m$  лежат в области неустойчивости (соответствующие значения  $\lambda_m$  показаны на рисунке 7).

Реализация устойчивого или неустойчивого сценария затвердевания зависит от соответствующего значения скорости растяжения  $U_z$ . В регионах опускающегося расплава ( $V_z < 0$ ,  $U_z > 0$ ) процесс устойчив. В регионах поднимающегося расплава ( $V_z > 0$ ,  $U_z < 0$ ) процесс неустойчив к морфологическим возмущениям (также еще существует регион неустойчивости при  $U_z > 0$ ). Полученный результат находится в соответствии с оценками работы [19], где подобные выводы были сделаны на основе анализа действия композиционных сил.

Таблица 2 - Расчетные параметры земного ядра.

Скорость затвердевания ядра $u_s$	$6 \cdot 10^{-12} \text{ м с}^{-1}$
Коэффициент диффузии примеси $D_l$	$10^{-9} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$
Коэффициент температуропроводности $\kappa_l$	$6 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$
Коэффициент температуропроводности $\kappa_s$	$7 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$
Коэффициент теплопроводности $k_l$	$63 \text{ Дж м}^{-1} \text{ }^0\text{К}^{-1} \text{ с}^{-1}$
Коэффициент теплопроводности $k_s$	$79 \text{ Дж м}^{-1} \text{ }^0\text{К}^{-1} \text{ с}^{-1}$
Коэффициент распределения примеси $k$	0.25
Скрытая теплота $L_v$	$6.84 \cdot 10^9 \text{ Дж м}^{-3}$
Плотность жидкого ядра $\rho_l$	$12 \cdot 10^3 \text{ кг м}^{-3}$
Коэффициент Гиббса-Томсона $\Gamma$	$1.6 \cdot 10^{-7} \text{ }^0\text{К м}$
Температурный градиент $G_l$	$-10.9 \cdot 10^{-4} \text{ }^0\text{К м}^{-1}$
Наклон ликвидуса $m_c$	$-1.1 \cdot 10^4 \text{ }^0\text{К}$
Наклон ликвидуса $m_p$	$9 \cdot 10^{-9} \text{ }^0\text{К Па}^{-1}$
Ускорение свободного падения $\bar{g}_{ICB}$	$4.4 \text{ м с}^{-2}$

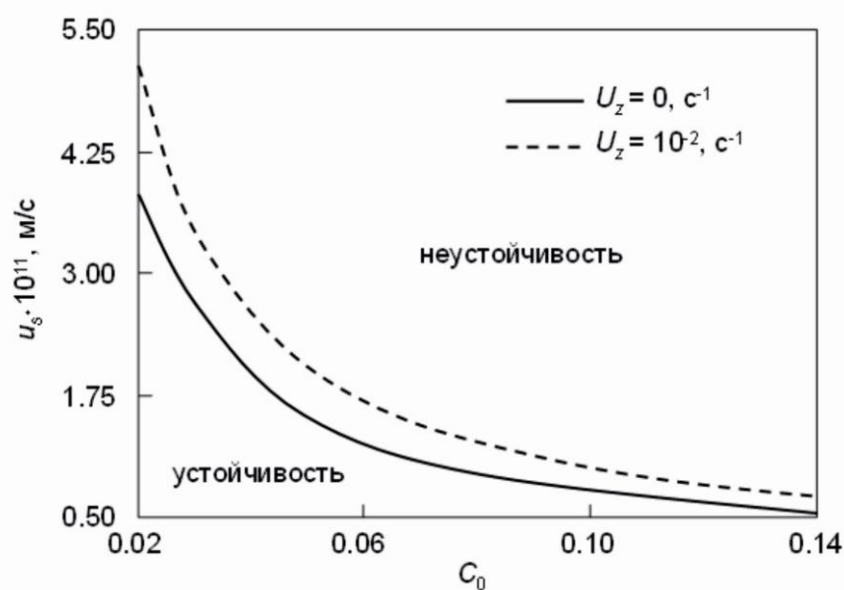


Рисунок 8 - Кривые нейтральной устойчивости (расчетные параметры системы приведены в таблице 2).

На рисунке 8 показаны кривые нейтральной устойчивости с учетом различных оценок для скорости затвердевания земного ядра  $u_s$ . Область устойчивости становится шире с уменьшением скорости кристаллизации. В целом, поведение этой функции аналогично безконвективной теории статьи [32]. Однако характерные величины  $u_s$  и  $C_0$  изменились по сравнению с этой работой. Поэтому, если скорость роста ядра Земли является эпизодической

(т.е., если на разных эволюционных стадиях значения  $u_s$  различны), возможна реализация как устойчивого, так и неустойчивого процесса.

Поскольку процесс кристаллизации ядра Земли аналогичен металлургическим процессам затвердевания металлов (в том числе и железо-никелевого, составляющего основу земного ядра), конвективная морфологическая неустойчивость также должна проявляться и для таких систем. На рисунке 9 по данным работы [21] показаны кривые нейтральной устойчивости для железо-никелевого сплава, затвердевающего в условиях, характерных для земной поверхности (теплофизические свойства этой системы приведены в таблице 3). При этом, процесс кристаллизации считается независимым от градиента давления, т.е.  $G_p = 0$ .

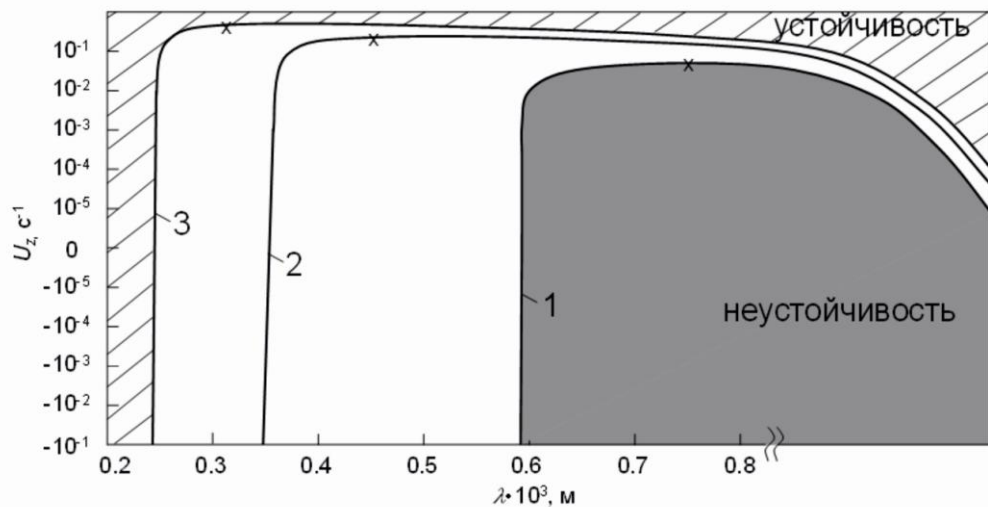


Рисунок 9 - Кривые нейтральной устойчивости для различных допустимых значений концентраций примеси  $C_0$ : ( $C_0 = 2$  вес % (1),  $C_0 = 4$  вес % (2) и  $C_0 = 7$  вес % (3)). Регионы устойчивости и неустойчивости соответственно находятся выше и ниже показанных зависимостей (зоны устойчивости и неустойчивости для концентраций  $C_0 = 7$  вес % и  $C_0 = 2$  вес % заштрихованы). Символы "x" соответствуют точкам максимума,  $u_s = 10^{-7}$  м с<sup>-1</sup>.

Еще раз специально отметим, что критерий (33) концентрационного переохлаждения удовлетворяется в областях устойчивости и неустойчивости. Поэтому принципиально возможна реализация двух сценариев затвердевания земного ядра: "концентрационное переохлаждение и морфологическая неустойчивость" и "концентрационное переохлаждение и морфологическая устойчивость". Первый из этих сценариев соответствует эволюции дендритных структур в области фазового перехода и приводит к формированию двухфазной зоны (состоящей из дендритов). Поскольку морфологическая неустойчивость не является автоматическим следствием концентрационного переохлаждения, второй сценарий

затвердевания описывает нуклеацию и последующий рост элементов твердой фазы на растворенных примесях в переохлажденной области при сохранении межфазной границей локально плоской формы.

Таблица 3 - Расчетные параметры железо-никелевого сплава.

Коэффициент диффузии примеси $D_l$	$5 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$
Коэффициент температуропроводности $\kappa_l$	$1.4 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$
Коэффициент температуропроводности $\kappa_s$	$4.4 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$
Коэффициент теплопроводности $k_l$	$41.9 \text{ Дж м}^{-1} \text{ }^0\text{К}^{-1} \text{ с}^{-1}$
Коэффициент теплопроводности $k_s$	$74 \text{ Дж м}^{-1} \text{ }^0\text{К}^{-1} \text{ с}^{-1}$
Коэффициент распределения примеси $k$	0.68
Скрытая теплота $L_v$	$1.4 \cdot 10^{10} \text{ Дж м}^{-3}$
Коэффициент Гиббса-Томсона $\Gamma$	$1.6 \cdot 10^{-7} \text{ }^0\text{К м}$
Температурный градиент $G_l$	$5 \text{ }^0\text{К м}^{-1}$
Наклон ликвидуса $m_C$	$-2.65 \text{ }^0\text{К вес \%}^{-1}$

Подчеркнем, что основным вкладом тепловой и композиционной конвекции являются модифицированные уравнения тепломассопереноса, которые, в свою очередь, приводят к модифицированным уравнениям для возмущений, развивающихся у границы с твердым ядром. Рассматриваемая теория показывает, что конвекция в расплаве сдвигает кривые нейтральной устойчивости (например, это показывает сравнение рисунка 8 с теорией статьи [32]) и приводит к существованию двух описанных выше сценариев затвердевания. Теории морфологической устойчивости ядра Земли, развитые ранее в работе [35] (без конвекции) и в работе [32] (конвекция учитывается частично; уравнения для возмущений безконвективные, а распределение концентрации примеси не является непрерывным вблизи границы ядра), показывают, что наиболее вероятным сценарием затвердевания является режим "концентрационное переохлаждение и морфологическая неустойчивость".

### 3. Определение условий коллапса двухфазной зоны и ее реальных размеров на основе развитой теории

Изучение этого вопроса проведем с помощью различных моделей области фазового перехода ядра Земли, после чего выполним их сравнительный анализ и оценим реальные размеры двухфазной зоны.

Начнем данный раздел с рассмотрения модели двухфазной области, заполненной растущими на примесях частицах твердой фазы, которая описывает сценарий затвердевания ядра "концентрационное переохлаждение и морфологическая устойчивость". При изложении материала будем использовать теорию, развитую ранее в работах [22, 23, 37]. Ради удобства рассуждений переместим начало системы отсчета  $z_1 = u_s t$  ( $z = 0$ ) на границу двухфазная область - расплав. Тогда вторая граница (двухфазная зона - твердая фаза) будет иметь координату  $z_1 = u_s t - \delta$  ( $z = -\delta < 0$ ). Температура  $T_m$  и концентрация примеси  $C_m$  в двухфазной области предполагаются однородными. Система уравнений тепломассопереноса в зоне фазового перехода имеет вид [30]

$$\rho_m(\varphi)c_m(\varphi)\frac{\partial T_m}{\partial t} + \rho_l c_l V(1-\varphi) \cdot \nabla T_m = \nabla k_m(\varphi) \nabla T_m + L_v \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} + V_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right), \quad (53)$$

$$(1-\varphi)\frac{\partial C_m}{\partial t} + V(1-\varphi) \cdot \nabla C_m = \nabla D_m(\varphi) \nabla C_m + (1-k)C_m \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} + V_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right), \quad (54)$$

где  $\varphi$  - доля твердой фазы растущих частиц,  $\rho_m(\varphi)$ ,  $c_m(\varphi)$ ,  $D_m(\varphi)$  и  $k_m(\varphi)$  - плотность, теплоемкость, коэффициент диффузии и коэффициент теплопроводности в области фазового перехода. Коэффициенты  $k_m$ ,  $D_m$  и произведение плотности на теплоемкость выражаются через свои значения в жидкой и твердой фазах в виде

$$k_m(\varphi) = k_l(1-\varphi) + k_s\varphi, \quad D_m(\varphi) = D_l(1-\varphi), \quad \rho_m(\varphi)c_m(\varphi) = \rho_l c_l(1-\varphi) + \rho_s c_s\varphi, \quad (55)$$

где  $\rho_l$  и  $\rho_s$  - плотности в жидкой и твердой фазах, а  $c_l$  и  $c_s$  - теплоемкости в этих фазах. Выражения (3.55) используются здесь лишь для конкретизации зависимостей. Их подробное обсуждение содержится в работе [38].

Концентрационное переохлаждение в двухфазной зоне записывается в виде разности температуры фазового перехода и локальной температуры

$$\Delta T = T_* + f_{liq}(C_m) - \rho_l g m_p z - T_m, \quad (56)$$

где в случае линейного ликвидуса  $f_{liq} = m_c C_m$ . Границы зоны фазового перехода  $z = 0$  и  $z = -\delta$  определяются из условий: переохлаждение равно нулю.



Поскольку в случае конвекции диффузия примеси сказывается слабо на механизм ее переноса, будем использовать уравнение Шейла [39] для описания массопереноса в двухфазной области. Такой подход часто используется в подобных задачах для описания процесса массопереноса (см., например, [40-42]). Уравнение Шейла является хорошим приближением для широкого диапазона экспериментальных условий [43]. Кроме того, будем рассматривать процесс в тех регионах поверхности ядра, где расплав опускается (поднимается). В этом случае конвективные слагаемые, соответствующие перпендикулярным направлениям  $x$  и  $y$ , намного меньше, чем слагаемое  $V_z(1-\varphi)\partial C_m/\partial z$ . Итак, после перехода в движущуюся систему координат  $z = z_1 - u_s t$ , имеем

$$(1-\varphi)\frac{dC_m}{dz} = (1-k)C_m\frac{d\varphi}{dz}.$$

Интегрирование этого уравнения дает зависимость концентрации примеси от доли твердой фазы

$$C_m(\varphi) = C_\infty(1-\varphi)^{k-1}, \quad (57)$$

где  $C_\infty$  - концентрация примеси на границе двухфазная область - расплав ( $z = 0$  при  $\varphi = 0$ ).

Далее комбинируя выражения (53) и (56), получаем дифференциальное уравнение для концентрационного переохлаждения  $\Delta T$

$$\frac{d^2\Delta T}{dz^2} + b_1(z)\frac{d\Delta T}{dz} + b_2(z) = 0, \quad (58)$$

где

$$b_1 = \frac{1}{k_m} \left( \frac{dk_m}{d\varphi} \frac{d\varphi}{dz} + \rho_m c_m (V_z - u_s) \right), \quad b_2 = -\frac{df_{liq}}{dC_m} \frac{d^2 C_m}{dz^2} - b_1 \left( \frac{df_{liq}}{dC_m} \frac{dC_m}{dz} - \rho_l g m_p \right) + \\ + \frac{L_v(u_s - V_z)}{k_m} \frac{d\varphi}{dz} - \frac{d^2 f_{liq}}{dC_m^2} \left( \frac{dC_m}{dz} \right)^2.$$

Здесь производные концентрации по  $z$  определяются выражением (57), где  $C_m = C_m(\varphi(z))$ . Уравнение (58) зависит от пока неизвестной функции  $\varphi$ , определяющейся процессами нуклеации и роста твердой фазы в двухфазной зоне.

Рассмотрим макроскопически однородную переохлажденную область фазового перехода, заполненную сферическими частицами твердой фазы. Скорость нуклеации таких частиц можно выразить в соответствии с теорией Френкеля-Зельдовича [44, 45]

$$I = I_* \exp\left(-\frac{P_*}{\Delta T^2}\right), \quad (59)$$

где  $p_*$  и  $I_*$  - размерное число Гиббса и предэкспоненциальный фактор. Образовавшиеся в двухфазной зоне частицы твердой фазы, превышающие некий критический размер, претерпевают дальнейший рост, а частицы меньше такового размера - растворяются [44]. Частицы твердой фазы радиуса  $r$  растут в соответствии с соотношением [46]

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\beta_* \Delta T}{1 + \beta_* L_v r / k_l}, \quad (60)$$

где  $\beta_*$  - кинетический коэффициент. Будем описывать эволюцию частиц твердой фазы в переохлажденном расплаве кинетическим уравнением для плотности функции распределения  $f(r, z, t)$  [34]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{dr}{dt} f \right) = 0, \quad (61)$$

с граничным условием

$$\left( \frac{dr}{dt} f \right)_{r=0} = I_* \exp\left(-\frac{P_*}{\Delta T^2}\right). \quad (62)$$

Здесь критический радиус частиц выбран равным нулю. Доля твердой фазы выражается через  $f$  в виде

$$\phi = \int_0^{\infty} \frac{4\pi}{3} r^3 f(r, z, t) dr. \quad (63)$$

Уравнения (60)-(62) в подвижной системе отсчета имеют вид

$$(1+qr) \frac{dr}{dz} + \frac{\beta_*}{u_s - V_z} \Delta T = 0, \quad (64)$$

$$\frac{\beta_* \Delta T}{u_s - V_z} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{f}{1+qr} \right) - \frac{\partial f}{\partial z} = 0, \quad (65)$$

$$f|_{r=0} = \frac{I_*}{\beta_* \Delta T} \exp \left( -\frac{p_*}{\Delta T^2} \right), \quad (66)$$

где  $q = \beta_* L_V / k_l$ . Отметим, что уравнения (64)-(66) не зависят от  $t$ .

Уравнение (65) с граничными условиями (66) и  $f = 0$  при  $z = 0$  имеет следующее решение [34]:

$$f(r, z) = \left( 1 + \frac{\beta_* L_V r}{k_l} \right) \eta \left( x(z) - y(r) \right) H \left( x(z) - y(r) \right), \quad (67)$$

где

$$x(z) = \frac{\beta_*}{u_s - V_z} \int_z^0 \Delta T(\xi) d\xi, \quad y(r) = r \left( 1 + \frac{\beta_* L_V r}{2k_l} \right), \quad \eta(u) = \frac{I_*}{\beta_* \Delta T(u)} \exp \left( -\frac{p_*}{\Delta T^2} \right),$$

а  $H(u)$  - функция Хевисайда.

Интегрируя уравнение (64) и принимая во внимание то, что  $r = 0$  при  $z = \zeta$ , получаем

$$r = q^{-1} \sqrt{1 + 2q \left( x(z) - x(\zeta) \right)} - 1. \quad (68)$$

Уравнение (3.68) определяет радиус  $r(z)$  кристаллов, появляющихся в точке  $z = \zeta$  области фазового перехода.

Выражения (67) и (68) определяют неизвестную функцию  $f$ , входящую в соотношение (63). Однако, уравнение (63) не позволяет выразить  $\varphi$  как явную функцию переменной  $z$ , поскольку  $f$  (входящая в  $\varphi$ ) зависит от  $\Delta T$ , которая зависит от  $\varphi$  в соответствии с дифференциальным уравнением (58). Перейдем теперь к решению этой интегро-дифференциальной задачи с помощью метода, развитого в книге [34].

Вводя новую переменную  $\zeta$  вместо  $r$  для любой фиксированной величины  $z$  с помощью соотношения

$$x(\zeta) = x(z) - y(r),$$

получим

$$\beta_* \Delta T(\zeta) d\zeta = (u_s - V_z)(1 + qr) dr.$$

Пределы интегрирования  $r = 0$  и  $r = r(\zeta = 0)$  преобразуются к пределам  $\zeta = z$  и  $\zeta = 0$ . Далее заменяя  $r$  на  $\zeta$  в (63) и учитывая (67) и (68), получаем

$$\phi(z) = \frac{4\pi I_*}{3(u_s - V_z)} \int_z^0 w(z, \zeta) \exp(p_* S(\zeta)) d\zeta, \quad (69)$$

где

$$w(z, \zeta) = q^{-3} \left( \overline{1 + 2q \left( x(z) - x(\zeta) \right)} - 1 \right)^3, \quad S(\zeta) = -(\Delta T(\zeta))^{-2}.$$

Параметр  $p_*$ , входящий в решение (69), обычно намного больше, чем  $(\Delta T)^2$ , благодаря большим энергиям нуклеации [46]. Поэтому для вычисления интеграла (69) можно воспользоваться методом Лапласа [47, 48]. Учитывая лишь главный член асимптотического разложения интеграла (69), имеем

$$\phi(z) = a(v_*) w(z, v_*), \quad (70)$$

$$a(\nu_*) = \frac{4\pi I_*}{3(u_s - V_z)} \sqrt{-\frac{\pi \Delta T^3(\nu_*)}{p_* \Delta T''(\nu_*)}} \exp\left(-\frac{p_*}{\Delta T^2(\nu_*)}\right),$$

где  $\nu_*$  - точка максимума переохлаждения в двухфазной зоне.

Выражение (70) показывает, что  $\varphi(z)$  обращается в ноль на границе двухфазная зона - жидкая фаза, поскольку  $w(\nu_*, \nu_*) = 0$ . Поэтому приближенно будем считать, что  $\varphi \approx 0$  в регионе  $\nu_* < z < 0$ . В этом случае уравнение (58) может быть легко проинтегрировано. Принимая во внимание граничные условия

$$\Delta T = 0, \frac{d\Delta T}{dz} = -G_l - \rho_l g m_p, z = 0,$$

в рассматриваемой области получаем

$$\Delta T = G_l z_0 e^{-z/z_0} - 1 - \rho_l g m_p z, z_0 = \frac{k_l}{\rho_l c_l (u_s - V_z)}. \quad (71)$$

Чтобы определить точку максимального переохлаждения, в уравнении (58) полагаем  $d\Delta T/dz = 0$ . Считая, что  $\varphi \approx 0$ , получаем

$$\nu = -z_0 \ln\left(-\frac{\rho_l g m_p}{G_l}\right). \quad (72)$$

Теперь с помощью уравнения (58) можно рассчитать величину концентрационного переохлаждения  $\Delta T$  в регионе  $-\delta < z < \nu_*$  с использованием граничных условий

$$\Delta T = \Delta T(\nu_*), \frac{d\Delta T}{dz} = 0, z = \nu_*,$$

где  $\Delta T(\nu_*)$  определяется уравнениями (71) и (72) при  $z = \nu_*$ . Уравнение (58) в этой зоне легко интегрируется численно. Доля твердой фазы  $\varphi(z)$  в этом регионе задается выражением (70). Протяженность  $\delta$  двухфазной зоны находится из граничного условия  $\Delta T = 0$  при  $z = -\delta$ . Таким образом, концентрационное переохлаждение, доля твердой фазы,

распределения температуры и концентрации примеси полностью определены в области фазового перехода.

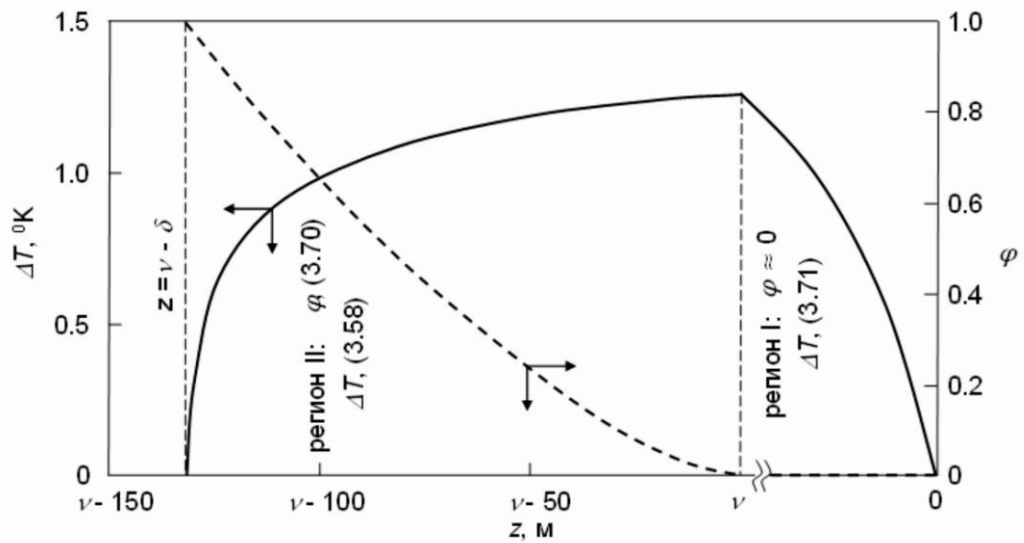


Рисунок 10 - Концентрационное переохлаждение и доля твердой фазы в двухфазной зоне в зависимости от пространственной координаты. Параметры системы приведены в таблице 2,  $G_l = -2.2 \cdot 10^{-4} \text{ } ^\circ\text{K м}^{-1}$ ,  $C_\infty = 0.01$ ,  $V_z = -10^{-9} \text{ м с}^{-1}$ ,  $c_l = 460 \text{ Дж кг}^{-1} \text{ } ^\circ\text{K}^{-1}$ ,  $\rho_s = \rho_l$ ,  $c_s = c_l$ ,  $I_* = 10^{39}$ ,  $\beta_* = 10^2 \text{ м с}^{-1} \text{ } ^\circ\text{K}^{-1}$ ,  $p_* = 230 \text{ } ^\circ\text{K}^2$  [34, 35],  $\nu_* = -8.7 \cdot 10^3 \text{ м}$ ,  $\delta = 132 \text{ м}$ .

Принципиальная структура области фазового перехода показана на рисунке 10. Видно, что переохлаждение увеличивается вблизи границы  $z = 0$  двухфазная зона - расплав (где  $\varphi \approx 0$ , а процессы нуклеации и роста кристаллов заторможены). Здесь имеется в виду увеличение переохлаждения по отношению к расстоянию  $-z$  от границы зоны с жидкостью. Когда переохлаждение достигает максимума, кристаллы твердой фазы растут наиболее интенсивно. В результате, выделяющаяся ими скрытая теплота компенсирует концентрационное переохлаждение, исчезающее на границе зоны и твердой фазы. Скорость расплава, направленная в направлении  $-z$ , приводит к увеличению слоя, где происходит рост твердой фазы (регион II) по сравнению со случаем неподвижной жидкости. Проведенные расчеты показывают, что протяженность этой области составляет порядка нескольких сотен метров. Поскольку нуклеация и рост твердой фазы происходят в области I, то именно ее можно называть двухфазной зоной.

Подобное поведение переохлаждения и доли твердой фазы характерно для кристаллизующегося в обычных условиях железо-никелевого расплава. Соответствующие зависимости для этой системы по данным таблицы 3 (согласно статье [21]) продемонстрированы на рисунке 11.

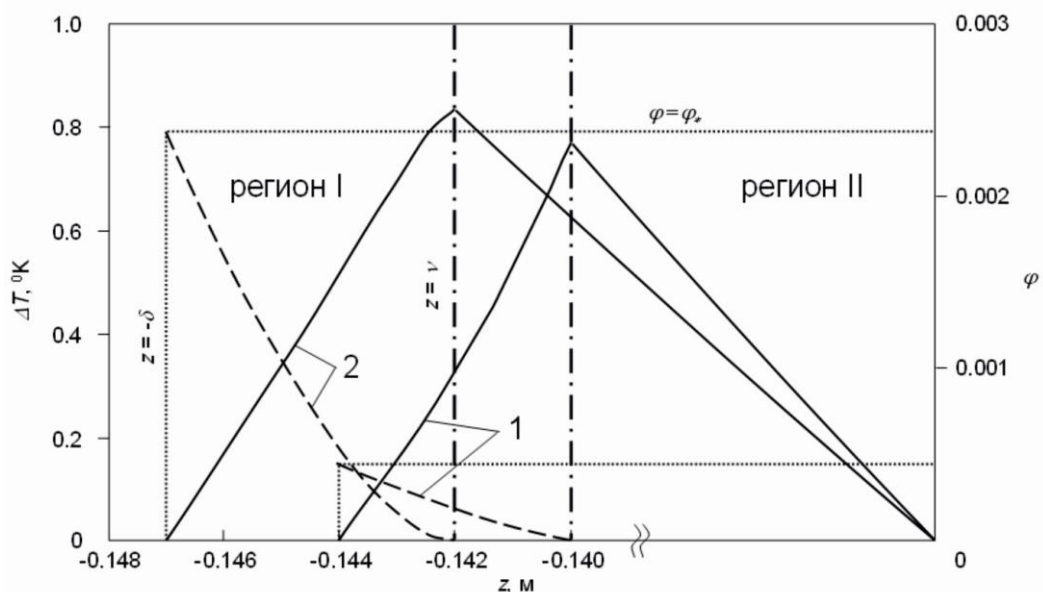


Рисунок 11 - Концентрационное переохлаждение (сплошные линии) и доля твердой фазы (штриховые линии) в двухфазной зоне в зависимости от пространственной координаты при различных скоростях натекающего расплава:  $V_z = -2 \cdot 10^{-5} \text{ м с}^{-1}$  (1) и  $V_z = -3 \cdot 10^{-5} \text{ м с}^{-1}$  (2). Параметры системы приведены в таблице 3,  $u_s = 10^{-6} \text{ м с}^{-1}$ ,  $C_\infty = 7 \text{ вес \%}$ ,  $G_s = 100 \text{ }^\circ\text{К м}^{-1}$ ,  $\beta_* = 10^2 \text{ м с}^{-1} \text{ }^\circ\text{К}^{-1}$ ,  $p_* = 10 \text{ }^\circ\text{К}^2$ ,  $I_* = 10^{10}$ .

Развиваемая теория показывает принципиальную возможность возникновения у границы твердого ядра Земли области фазового перехода, которая заполнена нуклеирующими частицами твердой фазы. Причем, наиболее вероятно это происходит в тех местах поверхности, где расплав опускается к ядру. Однако, рассматриваемая теория не учитывает механизмы слияния частиц в кластеры, возникающие на поздних стадиях их укрупнения.

Перейдем теперь к рассмотрению простейшей модели двухфазной области, заполненной дендритными структурами. Как и ранее, будем использовать систему координат, движущуюся с постоянной скоростью  $u_s$  в направлении расплава. При этом,  $z=0$  и  $z=-\delta$  соответствуют границам двухфазная область - жидкость и двухфазная область - твердая фаза. Вообще говоря, двухфазная зона появляется в результате возникновения концентрационного переохлаждения и морфологической неустойчивости локально плоской поверхности фазового перехода. Растущие дендриты (и подобные им образования) выделяют скрытую теплоту затвердевания и компенсируют концентрационное переохлаждение. В случае квазиравновесного затвердевания переохлаждение (см. выражение (56)) стремится к нулю. Напомним, что теоретическое описание такого сценария

кристаллизации впервые было предложено в работах [49-52]. Затем в работах [24-27] были разработаны методы решения уравнений квазиравновесной зоны в случае отсутствия конвекции. Рассмотрим ниже конвективную теорию такого процесса затвердевания.

Система нелинейных уравнений, описывающая тепломассоперенос в области фазового перехода, состоит из уравнений (53), (54) и следующего соотношения, вытекающего из (56):

$$T = T_* + m_c C_m - \rho_l g m_p z \quad (73)$$

в случае линейной зависимости ликвидус (нелинейная зависимость ликвидус может быть легко учтена в соответствии с теорией работы [21]).

Решение уравнения (54), как и ранее, задается выражением (57). Для интегрирования уравнения (53) рассмотрим ситуацию, когда третье слагаемое в правой части зависимости (53) много меньше остальных слагаемых. Подставляя теперь  $T_m(C_m)$  и  $C_m(\varphi)$  из формул (57) и (73) в уравнение (53), получаем дифференциальное уравнение для  $z(\varphi)$ . Интегрируя это уравнение с граничным условием при  $z = 0$

$$\varphi = 0, \frac{d\varphi}{dz} = \frac{(G_l + \rho_l g m_p)}{m_c C_\infty (1-k)},$$

имеем

$$z(\varphi) = m_c C_\infty (k-1) \int_0^\varphi \frac{k_m(\phi_1)(1-\phi_1)^{k-2}}{L_v(V_z - u_s)\phi_1 + I(\phi_1) + A_*} d\phi_1, \quad (74)$$

где

$$I(\varphi_1) = m_c C_\infty (k-1) \int_0^{\varphi_1} P(\varphi_2)(1-\varphi_2)^{k-2} d\varphi_2,$$

$$P(\varphi_2) = \rho(\varphi_2)c(\varphi_2)(V_z - u_s), A_* = -k_l \left( G_l + \rho_l g m_p \right)$$



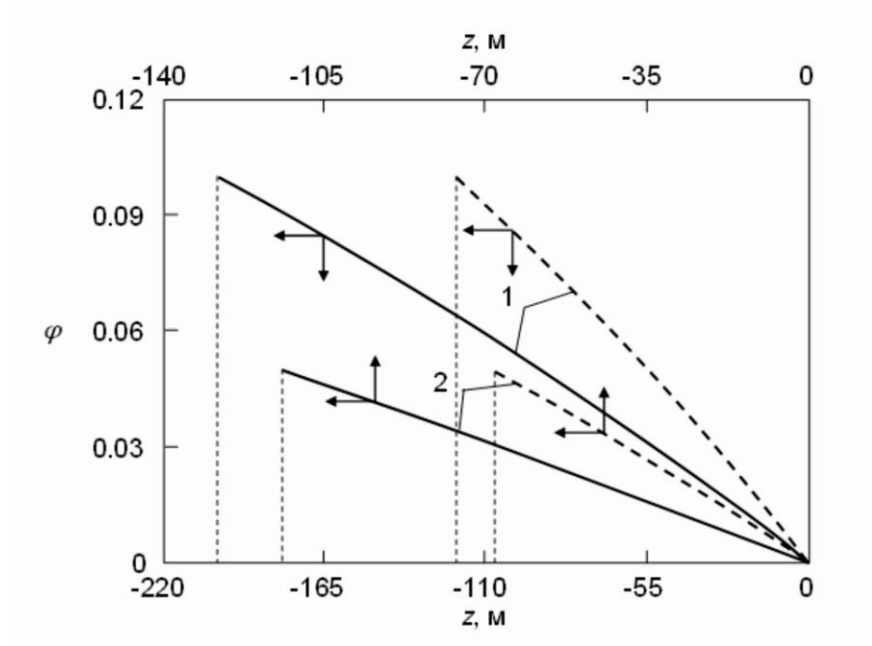


Рисунок 12 - Доля твердой фазы в зависимости от пространственной координаты в двухфазной области земного ядра при различных концентрациях примеси  $C_\infty = 0.04$  (1) и  $0.05$  (2);  $V_z = 3 \cdot 10^{-9}$  м с<sup>-1</sup> (сплошные линии) и  $V_z = 5 \cdot 10^{-9}$  м с<sup>-1</sup> (штриховые линии). Вертикальные линии показывают толщину двухфазной зоны.

Таким образом, все неизвестные определены в параметрическом виде  $C_m(\varphi)$ ,  $T_m(\varphi)$  и  $z(\varphi)$  выражениями (57), (73) и (74). Доля твердой фазы  $\varphi_*$  на границе двухфазной области с твердым ядром находится с помощью граничного условия (41), а протяженность области фазового перехода  $\delta$  определяется условием  $\delta = -z(\varphi_*)$ .

Рисунок 12 иллюстрирует распределение доли твердой фазы в двухфазной области ядра Земли в соответствии с расчетными параметрами, приведенными в таблице 2 ( $V_z > 0$  в регионах восходящей жидкости). Увеличение скорости жидкости  $V_z$  и концентрации примеси  $C_\infty$  приводит к уменьшению протяженности области фазового перехода  $\delta$ .

На рисунке 13 развиваемая теория проиллюстрирована для кристаллизации железоникелевого расплава в условиях земной поверхности (расчетные параметры системы приведены в таблице 3).

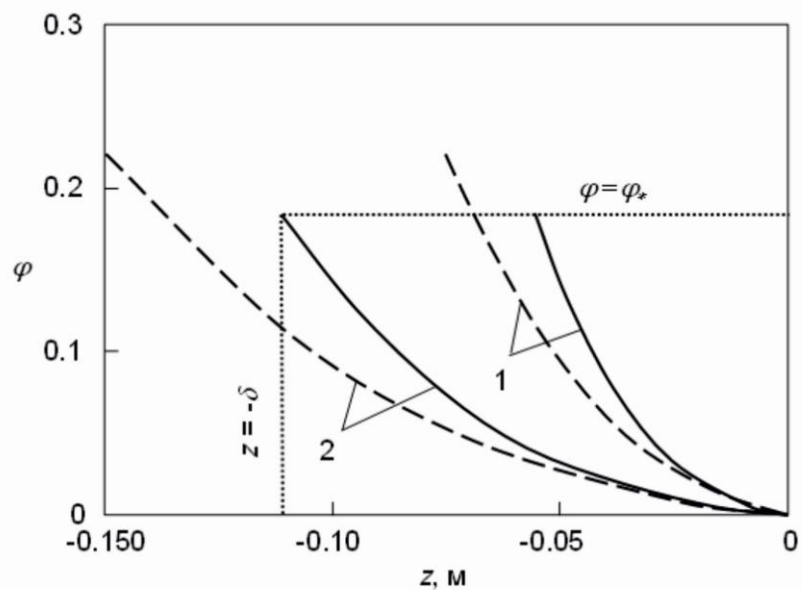


Рисунок 13 - Доля твердой фазы в зависимости от пространственной координаты в двухфазной области при различных скоростях течения расплава  $V_z = -0.5 \cdot 10^{-6} \text{ м с}^{-1}$  (сплошные линии) и  $V_z = -0.1 \cdot 10^{-6} \text{ м с}^{-1}$  (штриховые линии). Расчетные параметры расплава приведены в таблице 3,  $G_s = 100 \text{ }^{\circ}\text{К м}^{-1}$ ,  $C_{\infty} = 10 \text{ вес \%}$  (1) и  $C_{\infty} = 20 \text{ вес \%}$  (2). Вертикальная и горизонтальная линии показаны для  $V_z = -0.5 \cdot 10^{-6} \text{ м с}^{-1}$  и  $C_{\infty} = 20 \text{ вес \%}$ .

Важной особенностью приближенной теории этого раздела является то обстоятельство, что в ней пренебрегалось влиянием давления в уравнении ликвидус, не учитывалась зависимость скорости течения жидкости в двухфазной зоне от ее пористости, плотности и давления, также не учитвалось то обстоятельство, что плотность в реальных условиях непостоянна, а двухфазная область содержит каналы восходящего расплава, где отсутствует рост твердой фазы. Однако, более простая теория этого раздела (без учета этих зависимостей) позволила развить ряд приближенных методов аналитического решения сложных нелинейных уравнений тепломассопереноса. Более общее и близкое к действительности теоретическое описание области фазового перехода ядра Земли с учетом действия всех этих факторов представлено ниже.

Будем описывать эволюцию области фазового перехода ядра Земли конвективными уравнениями тепломассопереноса (53) и (54). Коэффициенты переноса, как и ранее, определяются формулами (3.55). Следуя работам [30, 52-55] течение расплава в двухфазной области будем описывать с помощью уравнения Дарси

$$(1-\phi)V = \frac{\Pi(\phi)}{\mu} (\rho_l - \rho_\infty)g - \nabla p, \quad (75)$$

где  $\Pi(\phi)$  - проницаемость двухфазной зоны,  $\mu$  - коэффициент динамической вязкости,  $\rho_\infty$  - плотность в расплаве на границе с двухфазной областью,  $p$  - давление.

Для зависимости проницаемости от доли твердой фазы в области фазового перехода будем использовать простейшее соотношение  $\Pi(\phi) = \Pi_0(1-\phi)^3$  [56-58]. Здесь  $\Pi_0$  - коэффициент проницаемости двухфазной зоны. Эта зависимость, часто используемая в модельных расчетах, является более простой версией соотношения Козени-Кармена  $\Pi(\phi) = \Pi_0(1-\phi)^3/\phi^2$  [31, 59]. Отметим, что первая из этих формул не имеет сингулярности при  $\phi \rightarrow 0$ , в отличие от второй.

Скорость течения жидкости в двухфазной зоне удовлетворяет уравнению неразрывности

$$\nabla \rho_l(1-\phi)V = 0. \quad (76)$$

Для учета эффектов всплытия примеси необходимо записывать зависимость плотности расплава от основных характеристик процесса. В случае интенсивной конвекции жидкости около поверхности ядра,  $\rho_l$  можно представить функцией только лишь концентрации примеси [11, 13]. Аппроксимируя такую зависимость линейной функцией, имеем следующее соотношение по аналогии с работой [30]:

$$\rho_l = \rho_\infty [1 + \gamma_c(C_m - C_\infty)]. \quad (77)$$

В уравнении (77)  $C_\infty$  - концентрация примеси в расплаве на границе с двухфазной областью, а  $\gamma_c$  - обычно положительный коэффициент [30]. Для оценки параметра  $\gamma_c$  можно воспользоваться тем фактом, что плотность в пределах жидкого ядра Земли изменяется приблизительно на 20 % [17] (это можно сделать по аналогии с формулой (22)).

Для квазиравновесной двухфазной зоны градиент температуры в ней выражается через градиенты концентрации примеси и давления как

$$\nabla T_m = m_c \nabla C_m + m_p \nabla p. \quad (78)$$

На границе твердого ядра с двухфазной зоной выполняется условие баланса тепла вида

$$k_s G_s - k_m n \nabla T_m = (1 - \phi_s) u_s L_v, \quad (79)$$

где  $G_s$  - температурный градиент в твердом ядре.

На границе двухфазная зона - расплав концентрация примеси, плотность и доля твердой фазы считаются известными

$$C_m = C_\infty, \rho_l = \rho_\infty, \varphi = 0. \quad (80)$$

Твердое ядро Земли охлаждаясь затвердевает благодаря отводу тепла в сторону мантии. Механизм такого теплоотвода называется механизмом струйной конвекции [60]. Процесс затвердевания ядра приводит к частичному вытеснению легкой примеси, которая с помощью механизма конвекции (такая композиционная конвекция возникает вследствие разности концентраций примеси [61]) перераспределяется в жидком ядре. В свою очередь, возникающая композиционная и тепловая конвекции управляют механизмом геодинамо планеты. Более полный литературный обзор по этому вопросу и связь между задачами генерации магнитного поля Земли, затвердеванием и конвекцией ядра даны в статье [1].

Вообще говоря, течения расплава в земном ядре управляются силами Лоренца, Кориолиса и Архимеда, действие которых компенсирует возможную турбулентность [19]. Поэтому, по крайней мере в первом приближении, конвективные течения расплава в ядре можно рассматривать как нетурбулентные. Очень вероятно, что такие течения представляют собой узкие протоки горячего восходящего расплава (каналы в двухфазной зоне) и широкие области более холодного нисходящего из недр жидкого ядра (от границы с мантией) расплава [19, 62]. Подобные процессы кристаллизации, протекающие в условиях земной поверхности, демонстрируют именно такое устройство конвективной области фазового перехода: в двухфазной зоне возникают каналы, по которым более горячий расплав или раствор отводятся из зоны, а в пространстве между такими каналами жидкость течет по направлению к границе твердая - фаза - двухфазная область [28, 29, 63-67]. При построении дальнейшей теории будем использовать методы аналитического решения работы [68].

Зависимость концентрации примеси от доли твердой фазы задается уравнением (57). Подставляя производную температуры  $dT_m/dz$  из (78) в (53) в движущейся системе отсчета,

принимая во внимание выражения (75) и (77) и вводя обозначение  $\psi(\varphi) = d\varphi/dz$ , получаем дифференциальное уравнение

$$\frac{d\psi}{d\varphi} = \frac{h_1(\varphi, \psi) + h_2(\varphi, \psi) + h_3(\varphi, \psi)}{k_m(\varphi)m_c C_\infty (k-1)(1-\varphi)^{k-2}\psi}, \quad (81)$$

где

$$\begin{aligned} h_1(\varphi, \psi) &= \rho_m c_m (V_z - u_s) \left[ k_c C_\infty (k-1)(1-\varphi)^{k-2}\psi + \right. \\ &\quad \left. + \rho_\infty \gamma_c C_\infty (1-\varphi)^{k-1} - 1 \right] g m_p - \frac{\mu(1-\varphi)V_z m_p}{\Pi(\varphi)} \Bigg], \\ h_2(\varphi, \psi) &= m_c C_\infty (k-1)(1-\varphi)^{k-3}\psi^2 \left[ k_m(\varphi)(k-2) - (k_s - k_l)(1-\varphi) - \right. \\ &\quad \left. - (k_s - k_l)(\rho_l - \rho_\infty) g m_p \psi, \right. \\ h_3(\varphi, \psi) &= k_m(\varphi) \gamma_c \rho_\infty C_\infty (k-1)(1-\varphi)^{k-2} g m_p \psi + L_v (V_z - u_s) \psi + \\ &\quad \left. + \frac{d}{d\varphi} \left( \frac{k_m(\varphi) \mu(1-\varphi)V_z m_p}{\Pi(\varphi)} \right) \psi. \right. \end{aligned}$$

Далее интегрируя уравнение (76) можно определить вертикальную компоненту скорости в виде

$$V_z(\varphi) = \frac{A_0}{(1-\varphi)\rho_l(\varphi)}, \quad (82)$$

где  $A_0$  определяется через среднюю скорость течения жидкости  $\bar{U}$  следующим образом:

$$A_0 = \bar{U} \varphi_* \left( \int_0^{\varphi_*} \frac{d\varphi}{(1-\varphi)\rho_l(\varphi)} \right)^{-1}, \quad \bar{U} = \frac{1}{\varphi_*} \int_0^{\varphi_*} V_z(\varphi) d\varphi.$$

Доля твердой фазы  $\varphi_*$  на границе двухфазная область - твердая фаза находится через температурные градиенты в твердой  $G_s$  и жидкой  $G_l$  фазах на межфазной границе из пограничного условия (79)

$$\varphi_* = \frac{k_s G_s - k_l G_l - L_v u_s}{G_l (k_s - k_l) - L_v u_s}. \quad (83)$$

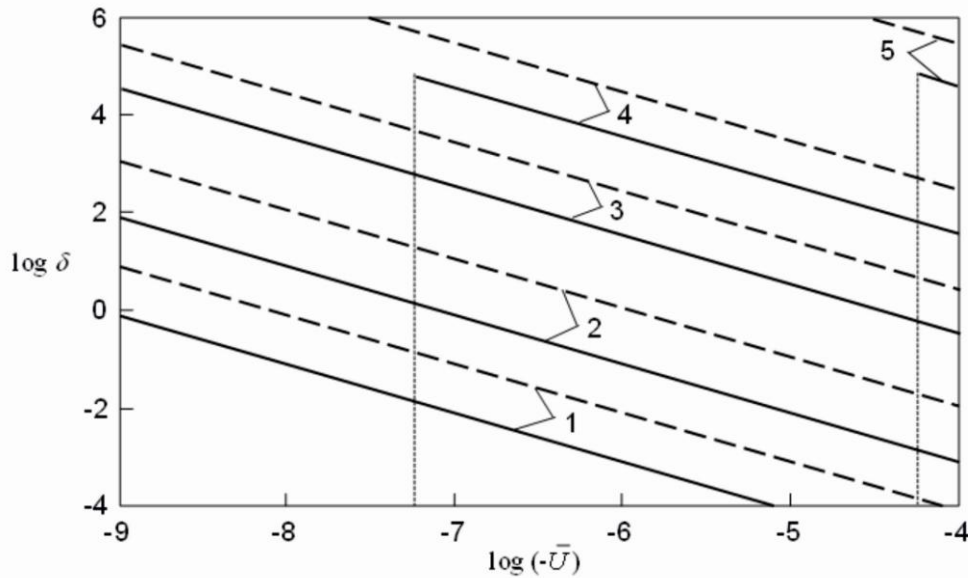


Рисунок 14 - Протяженность двухфазной области  $\delta$  (м) в зависимости от средней скорости жидкости  $\bar{U}$  (м/с) при различных градиентах температуры и значениях  $\varphi_*$ :  $G_l = -5.4 \cdot 10^{-4} \text{ } ^\circ\text{K м}^{-1}$ ,  $\varphi_* = 0.043$  (сплошные линии),  $G_l = -3.7 \cdot 10^{-4} \text{ } ^\circ\text{K м}^{-1}$ ,  $\varphi_* = 0.432$  (штриховые линии). Расчетные параметры приведены в таблице 3,  $m_C = -1.1 \cdot 10^4 \text{ } ^\circ\text{K}$ ,  $u_s = 3.2 \cdot 10^{-12} \text{ м с}^{-1}$ ,  $\mu = 10^{19} \text{ Па с}$  (1),  $\mu = 10^{17} \text{ Па с}$  (2),  $\mu = 10^{15} \text{ Па с}$  (3),  $\mu = 10^{13} \text{ Па с}$  (4) и  $\mu = 10^{10} \text{ Па с}$  (5). Вертикальные линии показывают критические значения средней скорости жидкости  $\bar{U}_c$ . Здесь и далее при расчетах  $\gamma_c$  оценен как  $0.05/(C(\varphi_*) - C_\infty)$ ,  $c_l = 860 \text{ Дж кг}^{-1} \text{ } ^\circ\text{K}^{-1}$ ,  $\Pi_0 = 10 \text{ м}^2$ .

Теперь для уравнения (81) можно сформулировать граничное условие, следующее из выражений (75) и (78) при  $\varphi = \varphi_*$  ( $\varphi_*$  определяется формулой (83))

$$\psi = \frac{\mu(1-\varphi_*)V_z(\varphi_*)m_p / \Pi(\varphi_*) - G_l - (\rho_l - \rho_\infty)gm_p}{m_C C_\infty (k-1)(1-\varphi_*)^{k-2}}, \varphi = \varphi_*.$$

Таким образом, выражения (81)-(84) представляют собой одноточечную задачу Коши, решение которой  $\psi(\phi)$  легко находится.

Найденная функция  $\psi(\phi)$  позволяет определить протяженность двухфазной зоны  $\delta$  и распределение твердой фазы в двухфазной зоне в виде обратной функции

$$\delta = \int_{\phi_0}^0 \frac{d\phi}{\psi(\phi)}, \quad z(\phi) = \int_0^{\phi} \frac{d\phi}{\psi(\phi)}. \quad (85)$$

Графики 14-16 изображают результаты аналитического решения задачи (57), (81)-(85) для различных значений физических параметров, допустимых для затвердевания земного ядра (параметры системы приведены в таблице 4 и подписях к рисункам). Хорошо известно, что динамическая вязкость  $\mu$  ядра Земли по разным оценкам имеет очень широкий диапазон возможных значений: от  $10^{13}$  до  $10^{21}$  Па с [69],  $:10^7$  Па с [70, 71],  $:10^{-2}$  Па с [72, 73]. Проведенные расчеты показывают, что увеличение вязкости приводит к уменьшению протяженности двухфазной зоны. При этом, если принять очень низкие значения  $\mu$  (меньше или порядка, чем  $10^{10}$  Па с), то толщина  $\delta$  области фазового перехода превысит протяженность жидкого ядра Земли. Отсюда следует нижняя оценка для коэффициента динамической вязкости расплава земного ядра  $:10^{11}$  Па с. С другой стороны, если  $\mu$  станет больше, чем  $10^{19}$  Па с двухфазная зона исчезает ( $\delta$  обращается в ноль). Это дает верхнюю оценку для вязкости  $:10^{18}$  Па с. Поэтому, если двухфазная зона существует около твердого ядра Земли (а приведенный литературный обзор и теоретические результаты данной главы свидетельствуют об этом), допустимый интервал для значений динамической вязкости получается следующим:  $10^{11} - 10^{18}$  Па с.

Полученный интервал для вязкости уже значительно сузил неопределенность вышеприведенных оценок для  $\mu$ . Однако, область возможных изменений вязкости можно еще сузить путем сужения интервала типичных скоростей расплава у твердого ядра Земли. Полагая  $|\bar{U}| : 10^{-8} - 10^{-6}$  м с<sup>-1</sup> [36],  $G_l : -3.7 \cdot 10^{-4}$  °К м<sup>-1</sup> [35],  $u_s : 6 \cdot 10^{-12}$  м с<sup>-1</sup> [32], получаем  $\mu : 10^{14} - 10^{16}$  Па с. Рисунки 14 и 15 показывают, что возможные небольшие вариации допустимых для земного ядра значений параметров  $G_l$  и  $u_s$  могут расширить этот интервал до значений  $\mu : 10^{13} - 10^{17}$  Па с. Отметим, что возможные изменения коэффициента проницаемости  $\Pi_0$  двухфазной зоны обратно пропорциональны изменению динамической вязкости, согласно уравнению (75).

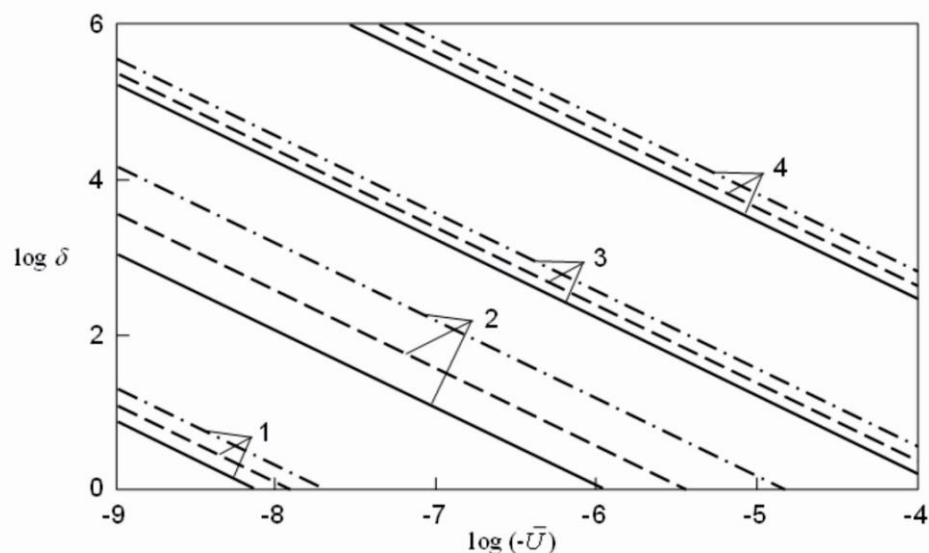


Рисунок 15 - Протяженность двухфазной области  $\delta$  (м) в зависимости от средней скорости жидкости  $\bar{U}$  (м/с) при различных допустимых значениях скорости роста ядра и различных значениях  $\varphi_*$ :  $u_s = 3.2 \cdot 10^{-12}$  м с<sup>-1</sup>,  $\varphi_* = 0.432$  (сплошные линии),  $u_s = 6 \cdot 10^{-12}$  м с<sup>-1</sup>,  $\varphi_* = 0.664$  (штриховые линии),  $u_s = 2 \cdot 10^{-11}$  м с<sup>-1</sup>,  $\varphi_* = 0.889$  (штрих-пунктирные линии). Расчетные параметры приведены в таблице 3,  $m_c = -1.1 \cdot 10^4$  °К,  $G_l = -3.7 \cdot 10^{-4}$  °К м<sup>-1</sup>,  $\mu = 10^{19}$  Па с (1),  $\mu = 10^{17}$  Па с (2),  $\mu = 10^{15}$  Па с (3) и  $\mu = 10^{13}$  Па с (4).

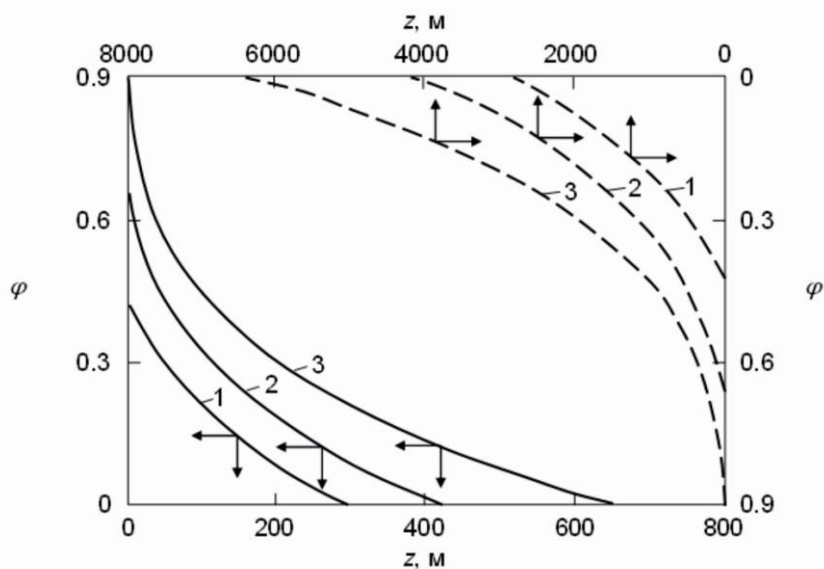


Рисунок 16 - Доля твердой фазы в зависимости от пространственной координаты в двухфазной зоне при различных допустимых значениях динамической вязкости жидкого ядра:  $\mu = 10^{15}$  Па с (сплошные линии) и  $\mu = 10^{14}$  Па с (штриховые линии). Расчетные параметры приведены в таблице 3,  $m_c = -1.1 \cdot 10^4$  °К,  $G_l = -3.7 \cdot 10^{-4}$  °К м<sup>-1</sup>,  $\bar{U} = -10^{-6}$  м с<sup>-1</sup>,  $u_s = 3.2 \cdot 10^{-12}$  м с<sup>-1</sup> (1),  $u_s = 6 \cdot 10^{-12}$  м с<sup>-1</sup> (2) и  $u_s = 2 \cdot 10^{-11}$  м с<sup>-1</sup> (3).



Рисунки 14-16 демонстрируют, что протяженность двухфазной области увеличивается при увеличении доли твердой фазы  $\varphi_*$ , скорости затвердевания  $u_s$ , а также температурного градиента  $G_l$  и уменьшении средней скорости жидкости  $|\bar{U}|$ , направленной от расплава к твердому ядру. Это связано с тем, что возрастание модуля скорости жидкости сжимает область концентрационного переохлаждения. С другой стороны, достаточно малые значения скорости (когда  $|\bar{U}| < |\bar{U}_c|$ , рисунок 14) не приводят к образованию двухфазной зоны благодаря недостаточному охлаждению, которое обеспечивается натекающим на твердое ядро расплавом. При увеличении  $|\bar{U}|$  скорость затвердевания  $u_s$  и доля твердой фазы  $\varphi_*$  возрастают при фиксированном значении  $\delta$  (рисунок 15).

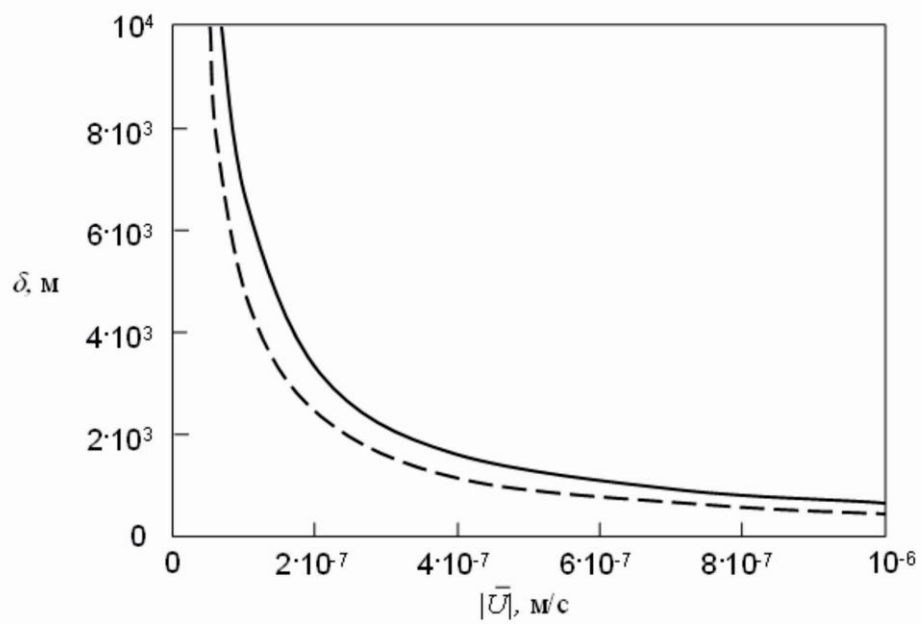


Рисунок 17 - Протяженность области фазового перехода в зависимости от средней скорости жидкости при различных значениях наклона ликвидуса  $m_c = -1.1 \cdot 10^4$  °К (сплошные линии),  $m_c = -10^2$  °К (штриховые линии). Расчетные параметры приведены в таблице 3,  $G_l = -3.7 \cdot 10^{-4}$  °К м<sup>-1</sup>,  $u_s = 2 \cdot 10^{-11}$  м с<sup>-1</sup>,  $\mu = 10^{15}$  Па с.

Оценим теперь влияние коэффициента наклона линии ликвидус  $m_c$  на протяженность двухфазной области. Этот параметр для ядра Земли также может изменяться в достаточно широких пределах от  $-10^2$  до  $-1.1 \cdot 10^4$  °К [32, 35]. В работе [32] на основе термодинамических оценок сделан вывод, что двухфазная зона может простирается до центра жидкого ядра Земли, если  $|m_c|$  больше, чем  $1.3 \cdot 10^3$  °К. С другой стороны, такие оценки приводят к значениям  $\delta : 3 \cdot 10^5$  м, если  $|m_c| : 10^2$  °К [32]. Другие оценки этой работы,

основанные на теории коллапсирующей двухфазной зоны, приводят к значениям  $\delta:10-10^5$  м (такой интервал значений возникает благодаря неопределенности в значении  $\mu$ ). Рисунок 17 показывает, что увеличение абсолютной величины этого коэффициента наклона ликвидуса приводит к возрастанию толщины зоны фазового перехода. При этом, меньшие значения  $|\bar{U}|$  дают увеличение разности значений  $\delta$  для двух кривых, изображенных на рисунке 17.

Таким образом, учет концентрационного переохлаждения, конвекции расплава и его вязкости, а также пористости двухфазной области показывает, что реальные размеры области фазового перехода могут быть не сотни метров (как следует из приближенной теории, рисунки 11 и 12), а гораздо больше – достигать значений вплоть до  $10^5$  м, что также согласуется с оценками других авторов (см. приведенный обзор работ).

#### **4. Нахождение характерного междендритного расстояния матрицы твердой фазы жидкой части ядра Земли**

Одним из наиболее важных параметров двухфазной области является междендритное расстояние  $\lambda_1$ . Это среднее расстояние между двумя вершинами соседних дендритов характеризует размер растущих кристаллов и влияет на гидродинамику двухфазной зоны. В случае квазистационарного затвердевания и осесимметричных дендритов междендритное расстояние записывается в виде [32]

$$\lambda_1 = \sqrt{\frac{2\pi R_d}{a_d(d\varphi/dz)_{ICB}}}, \quad (86)$$

где  $(d\varphi/dz)_{ICB} = \psi$  определяется граничным условием (84), а параметр  $a_d$  равен 1 и  $\approx 0.86$  соответственно для кубической и гексагональной дендритной упаковок.

Для определения соотношения между радиусом вершины дендрита  $R_d$  и скоростью роста  $u_s$  воспользуемся развитыми ранее теориями устойчивого роста дендритов [74-80]. Основные выводы этих работ такие: 1) поверхность дендрита является параболической около его вершины, 2) произведение  $R_d^2 u_s = const$ , 3)  $R_d^2 u_s = const$  не зависит от поперечных к направлению дендритного роста компонент скорости расплава и линейно возрастает с изменением продольной компоненты скорости жидкости  $|\bar{U}|$  в виде [80]

$$R_d^2 u_s = \frac{2d_0 D_l}{\sigma_d} \left( 1 + \frac{\chi_d d_0 |\bar{U}|}{D_l} \right) \quad (87)$$

для различных значений концентрации примеси порядка  $10^{-2}$ , типичных для границы твердое ядро - область фазового перехода. Здесь  $d_0$  - капиллярная константа,  $\sigma_d$  и  $\chi_d$  представляют собой константы, соответственно оцененные как 0.032 и 5300 [80].

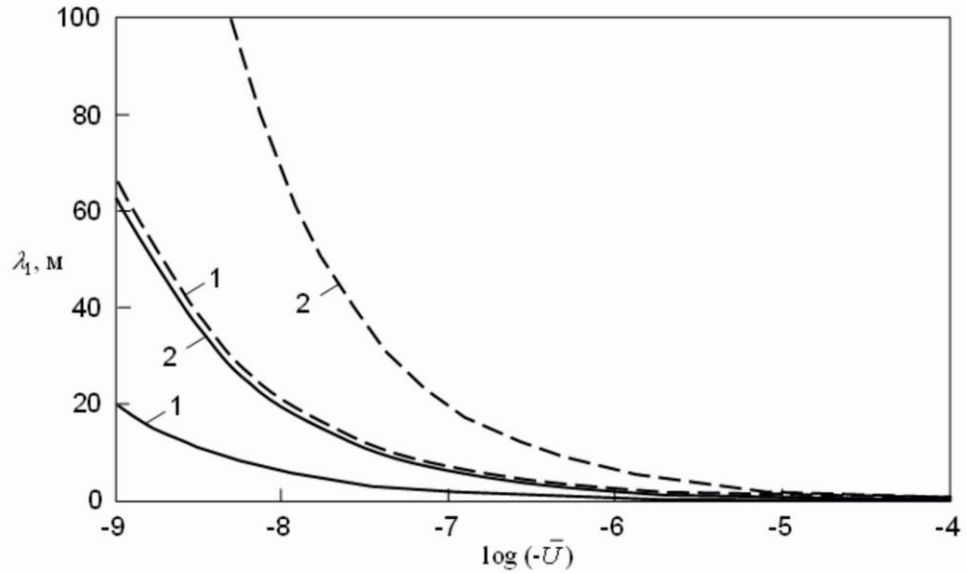


Рисунок 18 - Междендритное расстояние в зависимости от средней скорости жидкости при различных скоростях затвердевания:  $u_s = 2 \cdot 10^{-11} \text{ м с}^{-1}$  (сплошные линии) и  $u_s = 3.2 \cdot 10^{-12} \text{ м с}^{-1}$  (штриховые линии). Расчетные параметры приведены в таблице 3,  $m_c = -1.1 \cdot 10^4 \text{ } ^\circ\text{К}$ ,  $G_l = -3.7 \cdot 10^{-4} \text{ } ^\circ\text{К м}^{-1}$ ,  $a = 0.86$ ,  $d_0 = 10^{-9} \text{ м}$ ,  $\mu = 10^{15} \text{ Па с}$  (1) и  $\mu = 10^{14} \text{ Па с}$  (2).

Исключая теперь из выражений (86) и (87) радиус вершины дендрита  $R_d$ , находим междендритное расстояние  $\lambda_1$ . Рисунок 18 показывает влияние изменения допустимых значений скорости жидкости и коэффициента динамической вязкости на междендритное расстояние в области фазового превращения. Отметим, что полученные результаты содержат ранее сделанные оценки для междендритного расстояния в двухфазной зоне ядра Земли:  $\lambda_1 : 10 \text{ м}$  [32] и  $\lambda_1 : 10^2 \text{ м}$  [81]. Проведенные расчеты демонстрируют, что  $\lambda_1$  существенным образом зависит от условий затвердевания, реализуемых в двухфазной области земного ядра. Отметим, что радиус вершины дендрита лежит между двумя и шестью миллиметрами для всех кривых, изображенных на рисунке 18. Эти значения также согласуются с оценками работы [32], где  $R_d$  изменялся от одного миллиметра до одного сантиметра.

## **5. Изучение и анализ известных данных по междендритному расстоянию и протяженности двухфазной зоны в затвердевающем ядре Земли, существующих в мировой литературе**

В мировой литературе существуют различные оценки значений междендритного расстояния и протяженности двухфазной зоны ядра Земли. Известные авторам отчета работы были детально проанализированы и изложены в контексте оригинального исследовательского материала разделов 3 и 4. Важным обстоятельством является то, что рассмотренная авторская теория хорошо согласуется с данными теоретических работ других исследовательских коллективов и данными сейсмологической разведки. Отметим, что учет наличия области фазового перехода около ядра Земли ранее практически не производился в теоретических работах.

## **6. Сравнение полученных зависимостей по дестабилизирующим факторам, размерам двухфазной области, ее коллапсу и междендритному расстоянию с известными данными, существующими в мировой литературе**

Лабораторные эксперименты по кристаллизации бинарных расплавов и растворов являются хорошим инструментом для изучения структуры двухфазной зоны. Экспериментальные данные работ [64-67, 69] демонстрируют образование узких каналов в области фазового перехода, по которым расплав отводится из двухфазной зоны. В остальных же местах зоны расплав притекает к области фазового перехода. Такие конвективные течения обеспечивают усиленный теплоотвод от растущей твердой фазы в жидкую фазу через область двухфазного состояния вещества. Вероятно, подобная картина характерна и для затвердевания ядра Земли [36].

Оценим характерные горизонтальные размеры (вдоль поверхности земного ядра) такой двухфазной зоны. Пусть  $L_c$  обозначает среднее расстояние между каналами в области фазового перехода. Проинтегрируем уравнение теплопроводности (53) в приповерхностных слоях земного ядра, где жидкость в основном течет в горизонтальном направлении  $x$ . Рассматривая малые изменения  $\varphi$ , получаем следующее выражение вблизи поверхности ядра

$$\rho_m(\varphi)c_m(\varphi)V_xT_m \approx k_m(\varphi)\frac{dT_m}{dx} + L_vV_x\varphi, \quad (88)$$

где  $V_x$  -  $x$ -компонента скорости жидкости. При получении (88) константа интегрирования выбиралась из условия  $dT_m/dx \approx 0$ ,  $V_x \approx 0$  при  $x=0$  (начало системы отсчета  $x=0$  принято в точке, равноудаленной от двух соседних каналов, рисунок 19). Полагая  $\varphi \approx \varphi_*$  и  $V_x \approx const$  в окрестности межфазной границы интегрируем уравнение (88). В результате, получаем

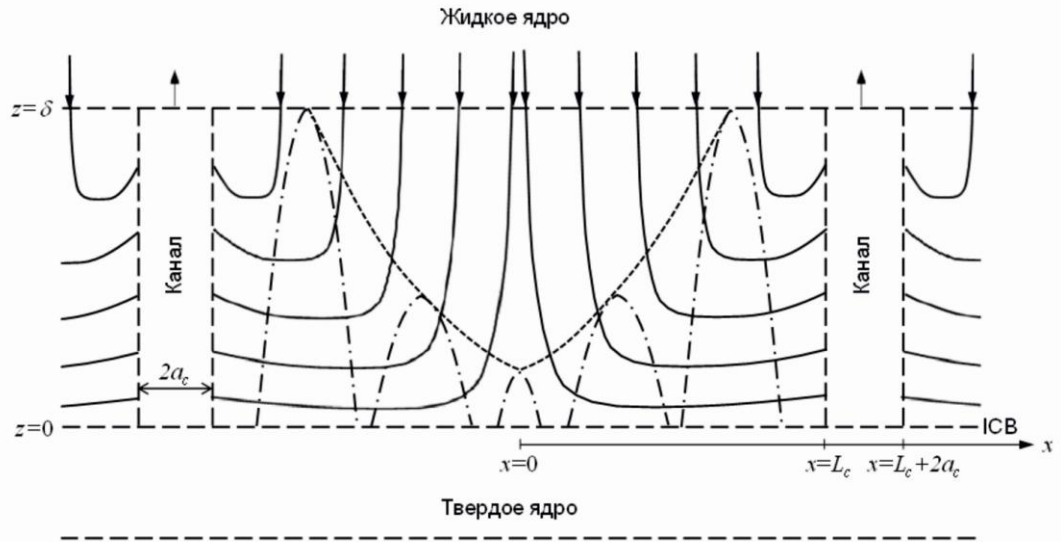


Рисунок 19 - Схематическое изображение двухфазной области ядра Земли. Линии тока показаны сплошными линиями со стрелками. Растущие дендриты показаны штрих-пунктирными линиями. Штриховые линии, соединяющие дендриты, демонстрируют протяженность области фазового перехода.

$$x \approx \frac{k_m(\varphi_*)}{\rho_m(\varphi_*)c_m(\varphi_*)V_x} \ln \left( \frac{T_m - T_u}{T_0 - T_u} \right), T_u = \frac{L_v \varphi_*}{\rho_m(\varphi_*)c_m(\varphi_*)}, \quad (89)$$

где  $T_m = T_0$  при  $x=0$ . Подставляя теперь в (89)  $T = T_L$  при  $x = L_c$ , находим характерный горизонтальный размер двухфазной зоны

$$L_c \approx \frac{k_m(\varphi_*)}{\rho_m(\varphi_*)c_m(\varphi_*)V_x} \ln \left( \frac{T_L - T_u}{T_0 - T_u} \right). \quad (90)$$

Здесь  $T_L$  и  $T_0$  можно оценить используя известные значения максимальной и минимальной температур ядра Земли, т.е. принять  $T_L \approx 6000$  °K, а  $T_0 \approx 5000$  °K [32]. Отметим, что среднее расстояние между двумя соседними каналами равно  $2L_c$ .

Характерный радиус  $a_c$  каналов в области фазового перехода можно оценить приравнивая потоки жидкости, идущие вверх и вниз, в виде

$$a_c \approx L_c \sqrt{\frac{|\bar{U}|}{|\bar{u}|}}, \quad (91)$$

где  $|\bar{U}|$  и  $|\bar{u}|$  обозначают средние скорости опускающейся и поднимающейся жидкости.

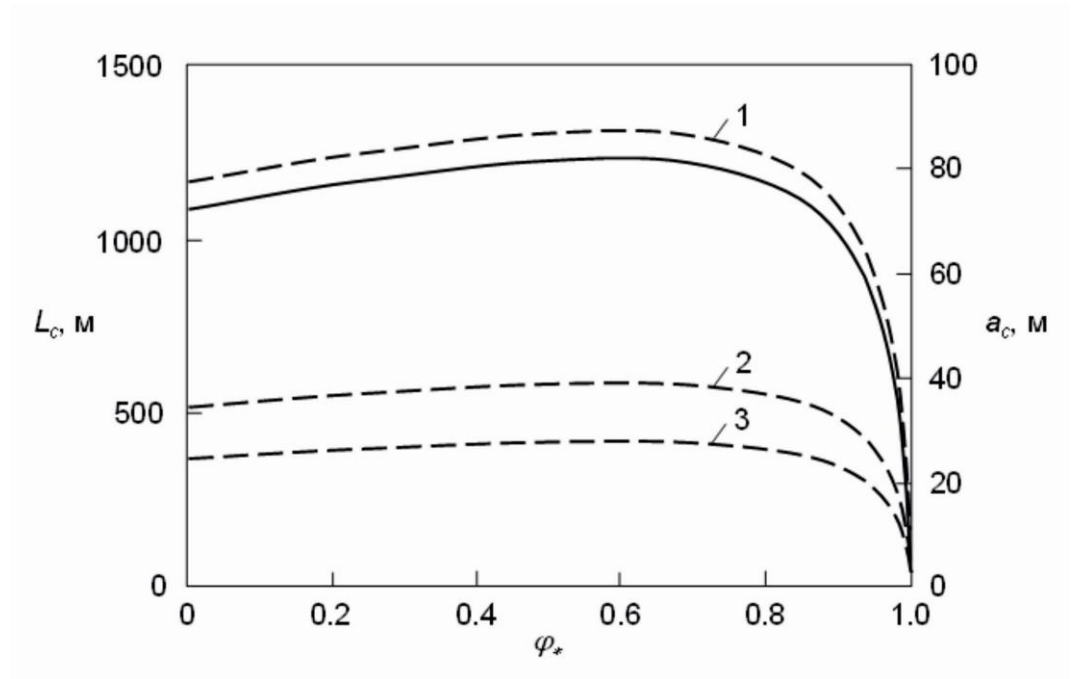


Рисунок 20 - Зависимости характерного расстояния  $L_c$  между каналами двухфазной зоны (сплошные линии) и характерного радиуса  $a_c$  каналов (штриховые линии) от доли твердой фазы на границе твердая фаза - область фазового перехода при различных значениях средней скорости жидкости:  $\bar{U} = -0.5 \cdot 10^{-6} \text{ м с}^{-1}$  (1),  $\bar{U} = -10^{-7} \text{ м с}^{-1}$  (2),  $\bar{U} = -0.5 \cdot 10^{-7} \text{ м с}^{-1}$  (3). Расчетные параметры приведены в таблице 3.3,  $V_x = 10^{-9} \text{ м с}^{-1}$ ,  $T_L = 6000 \text{ }^{\circ}\text{К}$ ,  $T_c = 5000 \text{ }^{\circ}\text{К}$ .

Средний радиус каналов и среднее расстояние между ними показаны на рисунке 3.20. Легко заметить, что радиус  $a_c$  увеличивается с возрастанием средней скорости жидкости  $|\bar{U}|$ , направленной к твердому ядру. Заметим, что полученная в настоящей работе оценка для  $a_c$  (меньше или порядка  $10^{-1} L_c$ ) согласуется с численными расчетами образования каналов в ячейках Хеле-Шоу, выполненных в статье [31].

Рисунок 19 иллюстрирует устройство области фазового перехода ядра Земли. Холодный расплав опускается от границы с мантией к твердому ядру в обширных регионах

(с характерным размером :  $2L_c$  ), а каналы более горячего восходящего расплава (свободные от дендритов области, где жидкость движется от твердого ядра к мантии) занимают сравнительно более узкие области (с характерным размером :  $2a_c$  ). Реальная двухфазная область, состоящая из дендритных образований, размещается между соседними каналами. Ее протяженность возрастает от центральной части (где расплав опускается) по направлению к каналам. Это, по-видимому, обусловлено тем обстоятельством, что притекающий холодный расплав также увеличивает и концентрацию примеси у межфазной границы (около точки  $x=0$  на рисунке 19), что, в свою очередь, замедляет процесс роста дендритов. По мере же удаления от центра (от точки  $x=0$  ) концентрация примеси у границы  $z=0$  становится меньше, что способствует дендритному росту. При некотором критическом значении средней скорости  $|\bar{U}_c|$  натекающего на зону расплава, его температура возрастает и, в некоторой области (около каналов), становится настолько высокой, что там рост дендритов не наблюдается. Поэтому двухфазная зона (как таковая) существует лишь на некотором удалении от горячих каналов восходящего расплава, по которым осуществляется конвективное охлаждение ядра Земли.

## 7. Разработка программы внедрения результатов НИР в образовательный процесс

№	Внедренный курс	Тип внедрения и тематика	Место внедрения
	1	2	3
1.	Тепломассоперенос	<p>Дополнение в уже существующий курс в виде новых лекций.</p> <p>Название лекций:</p> <p>«Математические модели затвердевания магматических расплавов» - 4 акад. часа.</p> <p>Рассматриваются математические модели кристаллизации магматического расплава с фронтом затвердевания и двухфазной зоной при учете конвекции и кинетики. Изучаются методы приближенного аналитического решения этих моделей.</p> <p>«Математические модели затвердевания ядра Земли» - 4 акад. часа.</p> <p>Рассматриваются математические модели затвердевания ядра Земли во фронтальном режиме процесса и при наличии протяженной области фазового перехода. Анализируется морфологическая устойчивость межфазной границы и определяется критерий концентрационного переохлаждения.</p>	УрГУ, математико-механический факультет, кафедра математической физики
2.	Аналитические методы механики	Дополнение в уже существующий курс в виде новых лекций.	УрГУ, математико-механический

	сплошных сред	Название лекций: «Конвективные течения в двухфазной зоне ядра Земли» - 2 акад. часа.	факультет, кафедра математической физики
3.	Уравнения математической физики	Дополнение в уже существующий курс в виде новых лекций. Название лекций: «Приближенные методы решения геофизических задач теплопереноса» - 4 акад. часа. Изучаются математические модели кристаллизации магматического расплава в земных условиях и условиях затвердевания ядра Земли. Обсуждаются приближенные методы построения аналитических решений моделей.	УрГУ, математико-механический факультет, кафедра математической физики
4.	Концепции современного естествознания	Дополнение в уже существующий курс в виде новых лекций. Название лекций: «Строение ядра Земли» - 2 акад. часа. Рассматриваются различные модели и экспериментальные данные по строению земного ядра. Обсуждается приближенная фронтальная модель процесса.	УрГУ, математико-механический факультет, кафедра математической физики
5.	Дополнительные главы механики сплошных сред	Дополнение в уже существующий курс в виде новых лекций. Название лекций: «Уравнения переноса в геофизике» - 2 акад. часа. Изучаются механизмы конвективного теплопереноса в условиях затвердевания ядра Земли и в условиях замерзания океанических льдов. Обсуждаются нелинейные уравнения и граничные условия процесса при наличии фронта и области фазового перехода.	УрГУ, математико-механический факультет, кафедра математической физики
6.	Физика	Дополнение в уже существующий курс в виде новых лекций. Название лекций: «Внутреннее строение Земли» - 2 акад. часа. Рассматриваются особенности строения различных регионов Земли – твердое и жидкое ядро, мантия. Обсуждаются механизмы генерации магнитогидродинамического динамо.	УрГУ, математико-механический факультет, кафедра математической физики
7.	Дифференциальные модели	Дополнение в уже существующий курс в виде новых лекций. Название лекций: «Дифференциальные модели затвердевания» - 2 акад. часа. Изучаются различные дифференциальные модели процессов затвердевания морского льда, лавы, жидкого ядра Земли, а также других подобных процессов.	УрГУ, математико-механический факультет, кафедра математической физики
8.	Теория двухфазной зоны	Новый курс в виде новых лекций. Название лекций: «Основные уравнения переноса тепла и массы» - 4 акад. часа.	УрГУ, математико-механический факультет, кафедра математической физики



		<p>Рассматриваются классические уравнения теплопереноса в безконвективном и конвективном режимах. Обсуждаются различные типы постановки граничных условий к этим уравнениям.</p> <p>«Граничные и начальные условия в задачах с подвижными границами фазовых переходов» - 4 акад. часа.</p> <p>Рассматриваются различные типы граничных и начальных условий, возникающих в задачах с движущимися границами фазовых переходов. Обсуждаются разные особенности указанных процессов, приводящие к изменению этих условий.</p> <p>«Методы решения уравнений двухфазной зоны» - 8 акад. часов.</p> <p>Рассматриваются приближенные методы нахождения аналитических решений нелинейных уравнений двухфазной зоны в квазистационарном, автомодельном и нестационарном режимах кристаллизации.</p>	
9.	<p>Геофизические задачи с подвижными границами</p>	<p>Новый курс в виде новых лекций.</p> <p>Название лекций:</p> <p>«Фронтальные модели затвердевания в геофизике» - 4 акад. часа.</p> <p>Рассматривается термодиффузионная модель Стефана для описания процессов замерзания морских льдов, затвердевания лавы и кристаллизации ядра Земли. Изучаются методы приближенного решения уравнений в условиях движущейся границы фазового превращения.</p> <p>«Геофизические модели затвердевания с протяженной областью фазового перехода» - 4 акад. часа.</p> <p>Рассматривается термодиффузионная модель типа Стефана при наличии протяженной области фазового перехода для описания процессов замерзания морских льдов, затвердевания лавы и кристаллизации ядра Земли. Изучаются методы приближенного решения уравнений в условиях движущихся границ фазового превращения.</p> <p>«Аналитические и численные методы решения геофизических задач с подвижными границами» - 8 акад. часов.</p> <p>Изучаются различные методы аналитического и численного решения нелинейных уравнений теплопереноса при наличии одной или нескольких подвижных границ фазового перехода. Рассматриваются разные типы граничных условий процесса.</p>	<p>УрГУ, математико-механический факультет, кафедра математической физики</p>
10.	<p>Нелинейная динамика в геофизике</p>	<p>Новый курс в виде новых лекций.</p> <p>Название лекций:</p> <p>«Принципы нелинейной динамики в геофизике» - 4 акад. часа.</p> <p>Изучаются классические методы для описания нелинейных динамических явлений в геофизике. Рассматриваются различные</p>	<p>УрГУ, математико-механический факультет, кафедра математической физики</p>

		<p>способы генерации стохастических шумов.</p> <p>«Нелинейные модели процессов со случайными возмущениями» - 4 акад. часа.</p> <p>Производится модификация классических уравнений тепломассопереноса при наличии случайных возмущений, моделируемых генерацией стохастических флуктуаций. Изучаются методы решения динамических уравнений.</p> <p>«Методы теории устойчивости в геофизике» - 8 акад. часов.</p> <p>Рассматриваются классические методы теории устойчивости тепломассообменных процессов. Изучается линейный анализ морфологической устойчивости ядра Земли при наличии конвективных течений расплава в его жидкой части.</p>	
--	--	--	--

## 8. Обобщение результатов работы по всем этапам

В рамках работы над проектом было достигнуто разрешение всех поставленных в проекте проблем - решение новых актуальных задач современной геофизики, развитие новых нелинейных математических моделей и разработка новых методов их решения, а также достижение программных индикаторов и показателей. Обобщением является то обстоятельство, что развитая в рамках настоящего проекта теория описывает различные геофизические процессы, протекающие при наличии протяженной области фазового превращения – замерзание морских льдов, затвердевание магматических расплавов в лавовых потоках и камерах, кристаллизация ядра Земли. Разработанные математические модели и методы их решения также имеют широкую область применения в различных областях прикладной физики, поскольку связаны с решением часто встречающихся в науке задач типа Стефана при наличии одной или нескольких движущихся границ фазовых переходов. Поэтому результаты проекта, кроме решения конкретных геофизических задач, также имеют обобщение и на более широкий класс задач прикладной физики. Приведем ниже конкретные результаты, полученные в рамках реализации проекта.

### 1-й этап.

Разработаны и развиты математические модели, описывающие процессы затвердевания магматического расплава на основе теорий тепломассопереноса, двухфазной зоны и экспериментальных данных. Аппроксимирован тепловой поток в двухфазной зоне с учетом конвективных течений магмы и структурно-фазовых превращений. Выполнено уточнение законов тепломассопереноса в области фазового перехода и определены адаптированные граничные условия на межфазных границах. Сделана оценка характерных времен процесса и разработаны методы решения нелинейной математической модели с движущимися

границами фазовых превращений. Определены распределения температуры, концентрации примеси и доли твердой фазы, законы движения границ области фазового перехода и скорости процесса затвердевания. Разработана и решена математическая модель трехмерного роста дендритов в магматическом расплаве с конвекцией при учете турбулизации жидкости вблизи межфазных поверхностей. Изучены и проанализированы известные данные по динамике затвердевания магматического расплава, существующие в мировой литературе. Выполнен учет кинетики снятия переохлаждения в математической модели затвердевания магматического расплава. Сформулированы необходимые уравнения и граничные условия, учитывающие кинетические механизмы роста твердой фазы. Оценены характерные времена процесса и разработаны методы решения нелинейной математической модели с движущимися границами фазовых превращений при учете кинетики роста. Определены распределения температуры, концентрации примеси и доли твердой фазы, законы движения границ области фазового перехода и скорости процесса затвердевания с учетом кинетики роста. Проведен анализ морфологической устойчивости трехмерного роста дендритов в магматическом расплаве с конвекцией. Изучены и проанализированы известные данные по динамике затвердевания магматического расплава с учетом кинетических механизмов роста, существующих в мировой литературе. Сделан анализ полученных распределений температуры, концентрации примеси и доли твердой фазы, динамики законов движения межфазных границ и скорости затвердевания во фронтальном режиме кристаллизации и в режиме кристаллизации с равновесной областью фазового перехода. Выполнено сравнение полученных результатов с существующими исследованиями в мировой литературе, не учитывающими наличие протяженной области фазового перехода в процессе затвердевания магматического расплава. Проанализированы полученные распределения температуры, концентрации примеси и доли твердой фазы, динамика законов движения межфазных границ и скорости затвердевания с учетом кинетических механизмов роста твердой фазы. Выполнено сравнение полученных результатов с существующими исследованиями в мировой литературе. А именно, получены следующие конкретные результаты.

Развита теория направленной кристаллизации во фронтальном режиме с учетом конвективного теплопереноса в расплаве при произвольных температурах охлаждающей границы, показателе интенсивности конвекции и температурно-зависимых коэффициентах кинематической вязкости и теплового расширения. Построены приближенные аналитические решения, соответствующие различным стадиям процесса кристаллизации с плоским фронтом. Сформулирована задача Коши для определения температуры расплава и координаты фронта затвердевания при постоянной температуре охлаждающей границы и произвольных значениях остальных параметров процесса.

Развита теория направленной кристаллизации с областью фазового перехода с учетом конвективного тепломассопереноса в расплаве при произвольных температурах охлаждающей границы, показателе интенсивности конвекции, нелинейном уравнении линии ликвидуса, температурно-зависимых коэффициентах кинематической вязкости и теплового расширения и произвольной зависимости коэффициента теплопроводности от доли твердой фазы. Определены значения доли твердой фазы в граничных точках двухфазной зоны и профиль ее распределения. Построены приближенные аналитические решения, соответствующие различным стадиям процесса кристаллизации с двухфазной зоной. Сформулирована задача Коши для определения температуры расплава и межфазной границы двухфазная область – жидкая фаза при постоянной температуре охлаждающей границы и произвольных значениях остальных параметров процесса.

Развита теория направленной кристаллизации с областью фазового перехода с учетом конвективно-кинетического тепломассопереноса в расплаве при произвольных температурах охлаждающей границы, показателе интенсивности конвекции, нелинейном уравнении линии ликвидуса, температурно-зависимых коэффициентах кинематической вязкости и теплового расширения и произвольной зависимости коэффициента теплопроводности от доли твердой фазы. При постоянной температуре охлаждающей границы решение системы пяти нелинейных уравнений сведено к решению двух обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Получено аналитическое решение нелинейной задачи при установившемся переохлаждении. Показано, что в этом случае процессы кристаллизации сверху и снизу становятся независимыми друг от друга.

Определено влияние показателя интенсивности конвекции, степени переохлаждения и кинетического коэффициента на динамику процесса кристаллизации с плоским фронтом и областью фазового перехода.

Впервые выполнен слабонелинейный анализ на морфологическую устойчивость дендритного кристалла в произвольном режиме роста в третьем порядке теории возмущений в случае квадратичной зависимости локальной скорости роста от переохлаждения. Обнаружено уменьшение радиуса устойчивости кристалла при увеличении амплитуды для номеров возмущающих гармоник выше второй при любых условиях. Проведено сравнение данных результатов с полученными ранее для случая линейной зависимости скорости роста от переохлаждения.

Рассмотрен традиционный критерий для определения критического радиуса потери морфологической устойчивости. Показано, что при увеличении амплитуды возмущения формы роста круглого кристалла  $k$ -ой гармоникой традиционный критерий, основанный на смене знака скорости роста амплитуды  $k$ -ой гармоники возмущения, становится

ошибочным из-за роста вкладов кратных гармоник. Предложен новый критерий определения критического радиуса потери устойчивости, учитывающий вклады возникающих кратных гармоник возмущения в локальную скорость роста кристалла. Получено, что критические радиусы устойчивости уменьшаются по мере увеличения амплитуды возмущения формы для всех гармоник при произвольном режиме роста.

Рассмотрен рост свободного дендрита в набегающем потоке жидкой фазы. Термодиффузионная модель процесса основана на стефановском приближении фронтальной границы между растущим кристаллом и окружающей его жидкостью и гидродинамических уравнениях Осеена. Из условия микроскопической разрешимости на основе линейного анализа устойчивости получен критерий устойчивого роста двумерного параболического дендрита с учетом анизотропии поверхностного натяжения на межфазной границе кристалл-расплав. Найденный критерий содержит ранее полученные критерии для роста изолированного дендрита в однокомпонентной среде с конвекцией жидкости и роста изолированного дендрита в неподвижной бинарной системе. Показано, что развиваемая теория справедлива при произвольных числах Рейнольдса и Пекле, определяемых скоростью набегающего на дендрит потока жидкости. Полученный критерий устойчивого роста дендрита в бинарной системе с конвекцией может быть протестирован в соответствии с результатами компьютерного моделирования. Это может, например, быть сделано аналогично моделированию методом фазового поля, ранее выполненном для свободного дендритного роста с конвекцией в однокомпонентной системе. Найденный критерий устойчивости может быть также протестирован экспериментально, как это сделано для дендритного роста с вынужденным течением прозрачной жидкости. Получение и анализ условия микроскопической разрешимости для высокоскоростного режима роста могут, например, быть сделаны аналогично анализу, выполненному в рамках гипотезы маргинальной устойчивости.

## 2-й этап.

Построена математическая модель, учитывающая влияние нелинейных факторов массопереноса: эффект Соре (термодиффузия) и температурная зависимость коэффициента диффузии в процессах массообмена, протекающих в жидкой части ядра. Описанная модель была решена численно в общем случае. Построено ее аналитическое решение для случая, когда время релаксации температурного поля много меньше, чем время релаксации концентрационного. Найденные решения позволили подтвердить некоторые особенности процесса, обнаруженные ранее для случая классического массопереноса. Например, была обоснована гипотеза о самоподобных (фрактальных) свойствах двухфазной зоны, подтверждено, что концентрация примеси в двухфазной зоне является функцией доли

твердой фазы и зависит от пространственной координаты как сложная функция. Аналитические решения проблемы позволили понять сложное влияние нелинейных эффектов массопереноса на процесс. Было выяснено, что рост коэффициента температурной зависимости диффузии может приводить как к увеличению протяженности зоны, так и к ее уменьшению, в зависимости от значений температурных градиентов в разных фазах. Действие же эффекта Соре зависит от знака коэффициента термодиффузии: в случае отрицательного значения этого коэффициента, термодиффузионный поток вещества направлен также, как и обычный диффузионный поток и усиливает его, в противном случае, потоки направлены в противоположные стороны и термодиффузия стремится погасить диффузионный перенос вещества. Кроме того, было показано, что рассматриваемые нелинейные эффекты способны изменять температурные и концентрационные профили в системе, долю твердой фазы в двухфазной зоне, скорость затвердевания, протяженность переохлажденной области и другие характеристики процесса по сравнению с классическим случаем массообмена.

Аналитически исследовано влияние слабой конвекции на кристаллизацию бинарного расплава. Выписана модель направленного затвердевания с одномерным потоком расплавленного вещества, натекающим на растущую твердую фазу. Получено ее точное решение и найдены выражения для всех параметров, описывающих процесс: распределение температуры и концентрации примеси по различным фазам, доля твердой фазы в двухфазной зоне, протяженности зоны и скорости движения ее границ. С помощью полученных аналитических решений было исследовано влияние конвекции на эволюцию процесса. Показано, что при увеличении скорости потока расплава скорость затвердевания также возрастает. Определены рамки применимости рассматриваемой одномерной конвективной модели - низкие скорости движения расплава (что вполне согласуется с физическими представлениями о процессе в условиях затвердевания железо-никелевого ядра) и выведены условия, при которых построенные аналитические решения разрушаются. Кроме того, был сделан вывод о том, что решения, полученные ранее для случая неподвижной жидкой фазы, неустойчивы по отношению к малым скоростям течения расплава.

Показано, что термоконцентрационная конвекция в расплаве является наиболее существенным и значимым физическим процессом, который необходимо учитывать в условиях затвердевания ядра Земли. В соответствии с этим выводом далее в работе развиты две модели затвердевания земного ядра с квазиравновесной и слабонеравновесной областями фазовых переходов.

Впервые проведено полное исследование процесса направленного затвердевания с неравновесной двухфазной зоной для ядра Земли, в которой переохлаждение существенно и

не считается близким к нулю. Построена слабонеравновесная модель процесса кристаллизации, которая включает в себя кинетические механизмы, отвечающие за появление и рост кристаллов в области концентрационного переохлаждения. Для описания этих механизмов использовалась теория объемной кристаллизации, в которой удалось вывести общие формулы, ранее найденные лишь для асимптотических режимов. Выписаны выражения для функций, задающих плотность распределения кристаллов по размерам и их объемной доли в двухфазном слое, вычислены радиусы частиц в зоне и определено общее число кристаллов в системе. Найденные аналитические решения позволили описать макроскопическое строение двухфазной зоны: удалось выделить три региона с принципиально разным поведением концентрационного переохлаждения. В слое, прилегающем к расплаву ядра, рост твердых кристаллов практически не происходит, их объемная доля близка к нулю и они слабо влияют на процесс. Поэтому в этом регионе переохлаждение растет почти по линейному закону. При достижении максимума концентрационного переохлаждения элементы твердой фазы начинают интенсивно расти и выделяемая ими скрытая теплота кристаллизации постепенно снимает переохлаждение (в этой области переохлаждение убывает), в результате чего, в прилегающем к твердому ядру регионе двухфазной зоны концентрационное переохлаждение падает. Исследованы рамки применимости рассматриваемой модели. Указано на невозможность применения используемой кинетической теории роста частиц для описания всей двухфазной зоны (теория не работает при больших значениях объемной доли твердой фазы), а также даны некоторые рекомендации, позволяющие адаптировать рассматриваемую модель для описания всей зоны. Определена протяженность двухфазной области, ее температура, концентрация и доля твердой фазы для физических параметров, характерных для расплавленной части ядра Земли (их значения брались в соответствии с известными литературными источниками).

Впервые разработана модель квазиравновесной области фазового перехода в условиях конвекции для описания кристаллизации ядра Земли. С помощью введения новой независимой переменной – доли твердой фазы в двухфазной зоне, удалось определить все ее характеристики. Были определены температурное и концентрационное поля в зависимости от доли твердой фазы, а также найдена зависимость пространственной координаты от доли твердого вещества. Таким образом, задача в квазиравновесном приближении точно решена в параметрическом виде. Важным обстоятельством является не только определение всех неизвестных зависимостей процесса, но и разработка самого метода решения задачи.

Модели слабонеравновесной и квазиравновесной областей фазового перехода дают значение протяженности области фазового перехода ядра Земли порядка нескольких сотен метров, что согласуется с существующими оценками.

### 3-й этап.

Для теоретического определения распределения доли твердой фазы в двухфазной зоне затвердевающего жидкого ядра Земли было аналитически исследовано влияние слабой конвекции на кристаллизацию магматического расплава. Модель процесса основана на конвективных уравнениях тепломассопереноса, осложненных наличием концентрационного переохлаждения. Аналитическое решение указанной модели получено как для квазиравновесных условий кристаллизации (когда концентрационное переохлаждение полностью компенсируется за счет выделения скрытой теплоты затвердевания), так и для неравновесных условий, когда в переохлажденной области фазового перехода происходит нуклеация и рост элементов твердой фазы. Это решение состоит в найденных зависимостях для распределений температуры и концентрации примеси по различным фазам, для доли твердой фазы в двухфазной зоне. Определенные профили позволили вычислить протяженность зоны фазового перехода в квазиравновесном и слабонеравновесном случаях. С помощью найденных аналитических решений было исследовано влияние конвекции на эволюцию процесса. Построенная теория позволила выполнить анализ влияния моделей квазиравновесной и неравновесной двухфазных зон, а также интенсивности конвективных течений расплава на долю твердой фазы в области фазового перехода. Так, например, в случае квазиравновесной двухфазной области доля твердой фазы больше, чем в случае слабо неравновесной области (или фронтальной постановки задачи). Поскольку в мировой литературе описываются два сценария кристаллизации ядра Земли – с дендритоподобной областью фазового перехода (рассмотренная здесь квазиравновесная теория) и с практически ровной межфазной границей (слабонеравновесная теория) можно заключить, что проведенные исследования актуальны и описывают экспериментально наблюдаемые физические условия.

Поскольку результаты этого этапа тесно связаны с результатами предыдущего, также необходимо подвести их совместный итог по развитым теориям квазиравновесной и неравновесной двухфазных зон. Общим выводом является, что термоконцентрационная конвекция в расплаве является наиболее существенным и значимым физическим процессом, который необходимо учитывать в условиях затвердевания ядра Земли. Проведено полное исследование процесса направленного затвердевания с неравновесной двухфазной зоной для ядра Земли, в которой переохлаждение существенно и не считается близким к нулю. Построена слабонеравновесная модель процесса кристаллизации, которая включает в себя



кинетические механизмы, отвечающие за появление и рост кристаллов в области концентрационного переохлаждения. Для описания этих механизмов использовалась теория объемной кристаллизации, в которой удалось вывести общие формулы, ранее найденные лишь для асимптотических режимов. Выписаны выражения для функций, задающих плотность распределения кристаллов по размерам и их объемной доли в двухфазном слое, вычислены радиусы частиц в зоне и определено общее число кристаллов в системе. Найденные аналитические решения позволили описать макроскопическое строение двухфазной зоны: удалось выделить три региона с принципиально разным поведением концентрационного переохлаждения. В слое, прилегающем к расплаву ядра, рост твердых кристаллов практически не происходит, их объемная доля близка к нулю и они слабо влияют на процесс. Поэтому в этом регионе переохлаждение растет почти по линейному закону. При достижении максимума концентрационного переохлаждения элементы твердой фазы начинают интенсивно расти и выделяемая ими скрытая теплота кристаллизации постепенно снимает переохлаждение (в этой области переохлаждение убывает), в результате чего, в прилегающем к твердому ядру регионе двухфазной зоны концентрационное переохлаждение падает. Исследованы рамки применимости рассматриваемой модели. Указано на невозможность применения используемой кинетической теории роста частиц для описания всей двухфазной зоны (теория не работает при больших значениях объемной доли твердой фазы), а также даны некоторые рекомендации, позволяющие адаптировать рассматриваемую модель для описания всей зоны. Определена протяженность двухфазной области, ее температура, концентрация и доля твердой фазы для физических параметров, характерных для расплавленной части ядра Земли (их значения брались в соответствии с известными литературными источниками). Впервые разработана модель квазиравновесной области фазового перехода в условиях конвекции для описания кристаллизации ядра Земли. С помощью введения новой независимой переменной – доли твердой фазы в двухфазной зоне, удалось определить все ее характеристики. Были определены температурное и концентрационное поля в зависимости от доли твердой фазы, а также найдена зависимость пространственной координаты от доли твердого вещества. Таким образом, задача в квазиравновесном приближении точно решена в параметрическом виде. Важным обстоятельством является не только определение всех неизвестных зависимостей процесса, но и разработка самого метода решения задачи. Модели слабонеравновесной и квазиравновесной областей фазового перехода дают значение протяженности области фазового перехода ядра Земли порядка нескольких сотен метров, что согласуется с существующими оценками.

Для определения условий возникновения магнитогидродинамического динамо на основе развитой обобщенной математической модели процесса тепломассопереноса была разработана теория конвективной кристаллизации (в приближении малой объемной доли твердой фазы). Другими словами, описана конвекция, управляемая композиционно-тепловыми эффектами при почти твердотельном вращении сферического слоя в неупругом приближении, хорошо описывающим жидкие ядра планет земного типа. Определено точное аналитическое сферически-симметричное решение конвективных уравнений тепломассопереноса, которое позволяет произвести линеаризацию общих (не сферически-симметричных) уравнений. Определено влияние интенсивности и направления конвективных течений расплава на энтропию и концентрацию примеси. Выполнен анализ динамики роста ядра Земли в зависимости от значений теплового потока на границе с внешней мантией (когда его значение превосходит адиабатический поток и когда оно меньше этого потока).

Выполнена большая работа по анализу известных данных о динамике затвердевания с двухфазной зоной и ее влиянию на магнитогидродинамическое динамо, которые существуют в мировой литературе. Здесь необходимо отметить тесную связанность предыдущего и настоящего этапов исследований. Поэтому этот анализ не ограничивается лишь списком цитируемой литературы в настоящем отчете. Он, безусловно, дополняется литературными ссылками по второму этапу.

Для анализа полученного распределения и влияния двухфазной зоны на магнитогидродинамическое динамо, а также их сравнения с существующими аналогами, не учитывающими наличие протяженной области фазового перехода в жидкой части ядра Земли была разработана теория магнитогидродинамической конвекции в жидком ядре Земли на основе тепломассообменной теории второго раздела. Выполнено масштабирование (обезразмеривание) гидродинамических и тепломассообменных уравнений с помощью введения безразмерных комплексов – чисел Россби и Экмана. Основным порядком в асимптотических разложениях найденных уравнений по этим малым комплексам приводит к конвективному решению, которое определяет течение, поддерживаемое дифференциальным вращением твердых границ сферического слоя. Аналитически показано, что за счет роста внутреннего твердого ядра происходит перераспределение углового момента в жидкой части ядра, что обеспечивает более быстрое вращение внутренней сферы относительно внешней мантии.

#### 4-й этап.

Хорошо известно, что температура фазового перехода зависит не только от концентрации растворенных в расплаве примесей, но также и от давления системы. Как

показывает сделанный в отчете литературный обзор, такая зависимость от давления ранее не учитывалась при анализе морфологической устойчивости границы фазового перехода для значений параметров системы, соответствующих кристаллизации ядра Земли. Кроме этого, при анализе устойчивости ранее не учитывалось размывание примеси благодаря конвекции расплава, также усиливающей отвод тепла и массы от определенных участков поверхности ядра. Поскольку физической причиной появления и развития неустойчивости ядра является концентрационное переохлаждение, сначала в отчете проанализирован критерий возникновения концентрационного переохлаждения при наличии градиента давления. Этот критерий отличается от традиционного критерия и имеет к нему предельный переход при стремлении давления системы к постоянной величине. Главное отличие от традиционного критерия концентрационного переохлаждения состоит в том, что для ядра Земли появляется новый стабилизирующий процесс фактор – градиент давления (температурный и концентрационный градиенты представляют собой дестабилизирующие морфологию ядра факторы).

Поскольку для ядра Земли существует физический механизм нарушения локально плоской морфологии межфазной границы, то при определенных значениях параметров системы будет наступать нарушение устойчивого процесса затвердевания. Для определения условий нарушения морфологической устойчивости в работе был проведен линейный анализ устойчивости с учетом зависимости фазовой диаграммы системы от концентрации примеси и давления, а также с учетом конвекции расплава. Все теоретические зависимости, определенные в ходе этого анализа имеют предельные переходы к ранее развитым теориям (когда не учитывался градиент давления и конвекция расплава).

В соответствии с процедурой исследования морфологической устойчивости в работе были определены квазистационарные решения, описывающие затвердевание ядра Земли с учетом зависимости температуры фазового перехода от давления. С учетом этих аналитических решений были выведены управляющие уравнения для возмущений температурного и концентрационного полей, а также возмущенные пограничные условия на границе фазового перехода. При этом, в соответствии с линейным анализом, граничные условия раскладывались в ряды вблизи квазистационарного решения вплоть до линейных слагаемых по возмущениям.

В соответствии с линейной теорией гидродинамической устойчивости были записаны экспоненциальные зависимости амплитуд возмущений от пространственных волновых чисел и частоты возмущений. Подстановка этих зависимостей в возмущенные уравнения конвективного тепло- и массопереноса, а также в возмущенные граничные условия позволила определить четыре линейных уравнения, связывающие амплитуды возмущений

температуры в твердой и жидкой фазах, амплитуды возмущений концентрации примеси и координаты межфазной границы ядра Земли с приведенным волновым числом и частотой возмущений. Исключение амплитуд возмущений из полученной системы уравнений позволило определить дисперсионное соотношение – зависимость между частотой и приведенным волновым числом. Приравниванием частоты (или декремента) возмущений к нулю в дисперсионном соотношении было выведено уравнение кривой нейтральной устойчивости процесса. Это уравнение определяет линию в плоскости любых параметров системы, при переходе через которую устойчивый режим роста ядра сменяется неустойчивым.

В работе были проанализированы кривые нейтральной устойчивости процесса в плоскостях изменения основных параметров системы – скорости растяжения, поверхностной концентрации примеси и скорости роста ядра Земли. Проведенный анализ позволил определить длины волн возмущений, соответствующие максимальным значениям частот. При этом максимальная частота имеет тенденцию к увеличению при уменьшении скорости растяжения. В целом, увеличение скорости растяжения приводит процесс в устойчивую зону для всех значений длин волн возмущений. Уменьшение же этого параметра (от положительных значений через ноль в отрицательную область) переводит процесс кристаллизации земного ядра в морфологически неустойчивую область.

В работе показано, что для значений параметров земного ядра критерий концентрационного переохлаждения выполняется всегда. При этом существует две принципиально разные области – регион устойчивого роста ядра и регион неустойчивого роста ядра. В работе дана физическая интерпретация этих результатов. Один из возможных сценариев затвердевания ядра «концентрационное переохлаждение и морфологическая неустойчивость» описывает развитие дендритных структур перед локально плоской границей ядра Земли и, таким образом, приводит к образованию протяженной двухфазной зоны, заполненной дендритами. Другой сценарий процесса «концентрационное переохлаждение и морфологическая устойчивость» формально означает, что перед остающейся локально плоской межфазной границей в переохлажденной зоне будет происходить гетерогенная нуклеация элементов твердой фазы на растворенных в расплаве примесях. В работе были определены параметры системы, соответствующие обоим из этих двух сценариев затвердевания. Отметим, что второй из них кажется менее вероятным, поскольку требует слишком больших переохлаждений и, возможно, соответствует просто фронтальному процессу затвердевания. Исследование этого вопроса составит предмет дальнейших исследований.

В работе проведен подробный анализ известных данных по морфологической устойчивости затвердевания ядра Земли с двухфазной зоной, существующих в мировой литературе. На основании такого анализа получены все теоретические результаты проекта.

В работе выполнено сравнение различных критериев морфологической и динамической устойчивости и критерия концентрационного переохлаждения. Сравнение проведено между вновь полученными критериями и ранее существующими в мировой литературе.

Поскольку результаты этого этапа тесно связаны с результатами предыдущего, также необходимо подвести их совместный итог. В обнаруженных на настоящем этапе областях морфологической неустойчивости локально плоской границы фазового перехода ядра Земли будет происходить развитие дендритоподобных структур, образующих протяженную область фазового перехода – двухфазную зону. Ее эволюция будет происходить частично в рамках теории квазиравновесной двухфазной зоны ядра Земли, развитой на предыдущем этапе.

#### 5-й этап.

Результаты работы по пятому этапу приведены ниже в разделе «Заключение».

Таким образом, полученные результаты показывают, что поставленные в проекте задачи решены полностью. Уровень полученных результатов соответствует мировому уровню, о чем свидетельствуют публикации коллектива авторов в престижных реферируемых изданиях. Использование полученных результатов будет осуществляться в дальнейшей научной работе коллектива авторов, а также в учебном процессе в Уральском федеральном университете.

По результатам проделанной работы было опубликовано 18 статей в российских и 14 статей в зарубежных изданиях. Среди тематических журналов, где представлены результаты исследований, имеются такие престижные издания, как «Physics of the Earth and Planetary Interiors» (импакт-фактор: 2.319), «International Journal of Heat and Mass Transfer» (импакт-фактор: 2.407), «Europhysics Letters (EPL)» (импакт-фактор: 2.171), «Physical Review E» (импакт-фактор: 2.255) и «ЖЭТФ» (импакт-фактор: 1.028). По результатам проделанной работы было зарегистрировано 2 программы для ЭВМ. В Приложениях 1-5 представлены различные подтверждающие документы по проделанной работе.

### **Список публикаций по проекту в целом**

#### Статьи в российских изданиях (включая доклады):

1. Александров Д.В., Малыгин А.П. Конвективная неустойчивость кристаллизации с зоной фазового перехода // ЖЭТФ, 2011, Т. 139, вып. 4, С. 688-694.
2. Александров Д.В., Малыгин А.П. Комментарий к статье "Симметричный тепломассоперенос во вращающемся сферическом слое", ЖЭТФ, том 121, вып. 3, 2002 // ЖЭТФ, 2012, Т. 141, Вып. 2, С. 292-293.
3. Зубарев А.Ю. Исакова Л.Ю. Ряшко Л.Б. К теории осциллирующих течений в сложных жидкостях // Коллоидный журнал, 2010, Т. 72.- С. 147.
4. Александров Д.В., Малыгин А.П. Нелинейная динамика фазовых переходов при замерзании морской воды с образованием ложного дна // Океанология, 2011, Vol. 51, N 6, P. 1000-1008.
5. Александров Д.В., Рахматуллина И.В., Малыгин А.П., К теории затвердевания с двухфазной зоной концентрационного переохлаждения // Расплавы, 2010, N 4, С. 88-96.
6. Александров Д.В., Малыгин А.П., Нетреба А.В. К теории направленной кристаллизации с зоной фазового перехода при наличии конвекции и кинетики в расплаве // Расплавы, 2011, N 4, С. 62-76.
7. Малыгин А.П., Александров Д.В. Аналитическое описание квазистационарной кристаллизации трехкомпонентных систем // Расплавы, 2011, N 6, С. 11-24.
8. Малыгин А.П., Александров Д.В. Конвективная неустойчивость фронта затвердевания. Модели двухфазной зоны // Расплавы, 2012, N 6, С. 1-17.
9. Александров Д.В., Малыгин А.П. Скейлинговые свойства области фазового перехода в процессах направленного затвердевания // Расплавы, 2012, N 5, С. 27-36.
10. Иванов А.А., Малыгин А.П. Нелинейные эффекты при направленной кристаллизации трехкомпонентных расплавов с образованием двухфазных зон // Расплавы, 2013, N 1.
11. Александров Д.В., Малыгин А.П. Линейный анализ устойчивости затвердевания с областью фазового перехода // Расплавы, 2013, N 1.

12. Низовцева И.Г., Александров Д.В. Влияние ложного дна на нелинейную динамику процесса замерзания воды // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер. Физ.-мат. науки, 2011, N 3, С. 89-99.
13. Александров Д.В., Галенко П.К., Малыгин А.П., Херлах Д.М., Отбор устойчивого режима роста вершины параболического дендрита при вынужденном конвективном течении и кристаллизации бинарной жидкости // Вестник Удмуртского университета, 2010, Вып. 1, С. 3-16.
14. Александров Д.В., Малыгин А.П., Александрова И.В. Квазистационарное затвердевание трехкомпонентных систем при наличии подвижных областей фазового перехода // Вестник Удмуртского университета, 2011, Вып. 2, С. 12-23.
15. Александров Д.В., Иванов А.О., Малыгин А.П., Александрова И.В., Нустров В.С. Масштабно-инвариантные свойства двухфазной области концентрационного переохлаждения // Вестник Удмуртского университета, 2012, Вып. 1, С. 43-54.
16. Александров Д.В., Малыгин А.П., Бритоусова А.В. Направленная кристаллизация бинарного расплава с конвекцией. Часть I. Фронтальный режим // Труды XIII Российской конференции «Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов», Т. 4, Екатеринбург, 12-16 сентября 2011, С. 50-53.
17. Александров Д.В., Малыгин А.П., Бритоусова А.В. Направленная кристаллизация бинарного расплава с конвекцией. Часть II. Область фазового перехода // Труды XIII Российской конференции «Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов», Т. 4, Екатеринбург, 12-16 сентября 2011, С. 54-57.
18. Александров Д.В., Малыгин А.П., Бритоусова А.В. Направленная кристаллизация бинарного расплава с конвекцией. Часть III. Кинетический режим // Труды XIII Российской конференции «Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов», Т. 4, Екатеринбург, 12-16 сентября 2011, С. 149-152.

Статьи в зарубежных изданиях (включая доклады):

1. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Coupled convective and morphological instability of the inner core boundary of the Earth // *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 2011, Vol. 189, P. 134-141.
2. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Convective instability of directional crystallization in a forced flow: The role of brine channels in a mushy layer on nonlinear dynamics of binary systems // *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2011, Vol. 54, P. 1144-1149.
3. Alexandrov D.V., Netreba A.V., Malygin A.P. Time-dependent crystallization in magma chambers and lava lakes cooled from above: The role of convection and kinetics on nonlinear dynamics of binary systems // *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2012, Vol. 55, P. 1189-1196.
4. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Flow-induced morphological instability and solidification with the slurry and mushy layers in the presence of convection // *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2012, Vol. 55, P. 3196-3204.
5. Alexandrov D.V., Malygin A.P. The steady-state solidification scenario of ternary systems: Exact analytical solution of nonlinear model // *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2012, Vol. 55, P. 3755-3762.
6. Martyushev L.M., Chervontseva E.A. Coexistence of axially disturbed spherical particles during their nonequilibrium growth // *EPL (Europhysics letters)*, 2010, Vol. 90, P. 10012-01 – 10012-06.
7. Martyushev L.M., Konovalov M.S. Thermodynamic model of nonequilibrium phase transitions // *Phys. Rev. E*, 2011, Vol. 84, P. 011113-01-07.
8. Malygin A.P., Alexandrov D.V. Analytical description of the quasi-stationary solidification of ternary systems // *Russian Metallurgy (Metally)*, 2012, N 2, P. 136-145.
9. Krutikova E., Ivanov A. Structure properties of polydisperse magnetic fluids // *Solid State Phenomena*, 2012, Vol. 190, P. 641-644.



10. Lee D., Alexandrov D.V., Huang H.-N. Numerical modeling of one-dimensional binary solidification with a mushy layer evolution // Numer. Math. Theor. Meth. Appl., 2012, Vol. 5, N 2, P. 157-185.
11. Lee D., Alexandrov D.V., Huang H.-N. Direct numerical simulation of a practical Stefan problem with a mushy-layer, Proc. On CD ROM "The 21th International Symposium on Transport Phenomena", Kaohsiung City, Taiwan, 2-5 November 2010, C06-01-061.
12. Alexandrov D.V., Malygin A.P., Alexandrova I.V. Morphological instability of the solid-liquid interface during directional solidification of binary mixtures with a mushy layer: the case of channel formation, Proc. On CD ROM "The 21th International Symposium on Transport Phenomena", Kaohsiung City, Taiwan, 2-5 November 2010, c06-07-028.
13. Nizovtseva I.G. The mushy-layer model of formation of the "false bottom" in the case of turbulent boundary conditions, Proc. On CD ROM "The 21th International Symposium on Transport Phenomena", Kaohsiung City, Taiwan, 2-5 November 2010, c06-04-134.
14. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Morphological instability of the sea ice – ocean interface in the presence of brine channels in a mushy layer // Proc. "8th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics", Pointe Aux Piments, Mauritius, 11-13 July 2011, P. 305-312.
15. Alexandrov D.V., Malygin A.P., Galenko P.K. Effect of a forced flow on 3D dendritic growth in binary systems // Proc. "8th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics", Pointe Aux Piments, Mauritius, 11-13 July 2011, P. 299-304.

Тезисы докладов на всероссийских конференциях и семинарах:

1. Александров Д.В., Малыгин А.П., Низовцева И.Г., Иванов А.А. Структурно-фазовые переходы при кристаллизации соленой воды: конвекция, анизотропия и неоднородность среды, Всероссийская школа-конференция молодых ученых и студентов "Математическое моделирование в естественных науках", Пермь, 6 – 9 октября 2010, С. 6-8.

2. Александров Д.В., Нетребя А.В., Малыгин А.П. К теории направленной кристаллизации с зоной фазового перехода при наличии конвекции и кинетики в расплаве // Тезисы докладов, “XVII Зимняя школа по механике сплошных сред”, Пермь, 28 февраля – 3 марта 2011, Р. 22.
3. Селезнев В.Д., Мартюшев Л.М. Принцип максимальности производства энтропии: приложения и связь со вторым началом термодинамики // Тезисы докладов, “XVII Зимняя школа по механике сплошных сред”, Пермь, 28 февраля – 3 марта 2011, Р. 283.
4. Малыгин А.П. Сферически-симметричные решения уравнений тепломассопереноса ядра Земли в неэластичном приближении. Морфологическая устойчивость процесса // Математическое моделирование в естественных науках, 3-6 октября 2012, Пермь, С. 114-115.

Тезисы докладов на международных конференциях и семинарах:

1. Lee D, Alexandrov D.V., Huang H.-N. Direct numerical simulation of a practical Stefan problem with a mushy-layer, Book of Abstracts “The 21th International Symposium on Transport Phenomena”, Kaohsiung City, Taiwan, 2-5 November 2010, P. 212.
2. Alexandrov D.V., Malygin A.P., Alexandrova I.V. Morphological instability of the solid-liquid interface during directional solidification of binary mixtures with a mushy layer: the case of channel formation, Book of Abstracts “The 21th International Symposium on Transport Phenomena”, Kaohsiung City, Taiwan, 2-5 November 2010, P. 218.
3. Nizovtseva I.G. The mushy-layer model of formation of the "false bottom" in the case of turbulent boundary conditions, Book of Abstracts “The 21th International Symposium on Transport Phenomena”, Kaohsiung City, Taiwan, 2-5 November 2010, P. 215.

В рамках проекта было подготовлено 3 кандидатских и одна докторская диссертации. Копии двух дипломов о присуждении ученой степени кандидатов наук приведены в Приложении 5. Одна докторская и одна кандидатская диссертации были подготовлены и представлены на пятом этапе выполнения работ по проекту. Информация о них приведена в разделе «Заключение».

## Заключение

По проделанной работе на пятом этапе можно сформулировать следующие результаты (согласно Техническому заданию и Календарному плану).

В результате тщательного теоретического анализа был получен ряд новых интересных результатов по поставленным в проекте задачам: 1. Определение основных параметров системы, дестабилизирующих процесс затвердевания и выявление роли этих параметров на ширину областей неустойчивости; 2. Нахождение критерия динамической неустойчивости затвердевания ядра Земли для самых опасных (быстрорастущих) возмущений, соответствующих нулевому волновому числу; 3. Определение условий коллапса двухфазной зоны и ее реальных размеров на основе развитой теории; 4. Нахождение характерного междендритного расстояния матрицы твердой фазы жидкой части ядра Земли; 5. Изучение и анализ известных данных по междендритному расстоянию и протяженности двухфазной зоны в затвердевающем ядре Земли, существующих в мировой литературе; 6. Сравнение полученных зависимостей по дестабилизирующим факторам, размерам двухфазной области, ее коллапсу и междендритному расстоянию с известными данными, существующими в мировой литературе; 7. Разработка программы внедрения результатов НИР в образовательный процесс.

По анализу этих задач можно сформулировать следующие конкретные научные выводы, связанные с результатами работ по всему проекту и представляющие собой единую теорию затвердевания земного ядра с двухфазной зоной:

1. Откорректированы аналитические решения уравнений тепломассопереноса в жидком ядре Земли для безконвективного фронтального процесса затвердевания. Определены сферически-симметричные распределения концентрации примеси и энтропии в расплаве ядра, а также зависимость скорости его роста от теплофизических параметров системы. Показано, что скорость затвердевания ядра Земли является возрастающей функцией удельного неадиабатического теплового потока.

2. Получены аналитические решения уравнений тепломассопереноса в жидком ядре Земли во фронтальном режиме кристаллизации с конвекцией. Определены соответствующие сферически-симметричные распределения концентрации примеси и энтропии. На основе найденных решений фронтальной модели показано, что скорость роста ядра больше в тех регионах, где более холодный расплав опускается к ядру и меньше в регионах, где поднимается более горячий расплав. Эта разница температур и скоростей является причиной морфологической неустойчивости межфазной границы.

3. На основе найденных фронтальных решений уравнений тепломассопереноса в жидком ядре показано, что около границы с твердым ядром всегда появляется концентрационное переохлаждение, также являющееся причиной морфологической неустойчивости локально-плоской границы фазового перехода.

4. Проведен линейный анализ морфологической неустойчивости локально-плоской межфазной границы ядра Земли при наличии конвективных течений расплава. Получен новый критерий морфологической неустойчивости и определена кривая нейтральной устойчивости процесса. Показано, что при различных скоростях течения расплава возможна реализация морфологически устойчивой и неустойчивой кристаллизации, существующей одновременно с концентрационным переохлаждением, что приводит к двум сценариям затвердевания: "концентрационное переохлаждение и морфологическая устойчивость" и "концентрационное переохлаждение и морфологическая неустойчивость".

5. Развита математическая модель двухфазной области, соответствующая найденным сценариям затвердевания ядра Земли. Получены приближенные аналитические решения этих моделей без учета зависимости параметров процесса от изменения давления и плотности.

6. Развита более полная модель процесса затвердевания земного ядра с областью фазового перехода, учитывающая течения расплава, зависимость фазовой диаграммы от концентрации примеси и давления, зависимость скорости течения жидкости от давления и проницаемости двухфазной зоны. Найдены приближенные аналитические решения этой нелинейной модели. Определены распределения температуры и концентрации примеси в области фазового перехода, доля твердой фазы, скорость затвердевания ядра Земли, протяженность двухфазной зоны.

7. Определены допустимые интервалы изменений динамической вязкости и наклона линии ликвидус, соответствующие формированию области фазового перехода у твердого ядра Земли. Найдено междендритное расстояние и средний радиус вершины растущих в области фазового перехода дендритов. Показано, что в двухфазной зоне существуют узкие протоки восходящего (горячего) расплава, а в остальной области более холодный расплав опускается к ядру. Определены характерные расстояния между такими каналами и их средний радиус. Детализировано устройство области фазового перехода ядра Земли.

Поскольку результаты этого этапа тесно связаны с результатами предыдущих этапов, также необходимо подвести их основной совместный итог – в рамках проекта построена единая теория затвердевания ядра Земли с протяженной областью фазового перехода, определяющая условия возникновения магнетогидродинамического динамо планеты.

## **Список публикаций подготовленных на 5 этапе**

Копии оттисков некоторых работ приведены в Приложении 1.

### Статьи в российских высокорейтинговых изданиях:

1. Малыгин А.П., Александров Д.В. Конвективная неустойчивость фронта затвердевания. Модели двухфазной зоны // Расплавы, 2012, N 6, С. 1-17.
2. Александров Д.В., Малыгин А.П. Скейлинговые свойства области фазового перехода в процессах направленного затвердевания // Расплавы, 2012, N 5, С. 27-36.

### Статьи в зарубежных высокорейтинговых изданиях:

1. Malygin A.P., Alexandrov D.V. Analytical description of the quasi-stationary solidification of ternary systems // Russian Metallurgy (Metally), 2012, N 2, P. 136-145.
2. Krutikova E., Ivanov A. Structure properties of polydisperse magnetic fluids // Solid State Phenomena, 2012, Vol. 190, P. 641-644.

### Статьи, принятые к печати в высокорейтинговые журналы:

1. Иванов А.А., Малыгин А.П. Нелинейные эффекты при направленной кристаллизации трехкомпонентных расплавов с образованием двухфазных зон // Расплавы, 2013, N 1.
2. Александров Д.В., Малыгин А.П. Линейный анализ устойчивости затвердевания с областью фазового перехода // Расплавы, 2013, N 1.

### Тезисы докладов:

1. Малыгин А.П. Сферически-симметричные решения уравнений тепломассопереноса ядра Земли в неэластичном приближении. Морфологическая устойчивость процесса // Математическое моделирование в естественных науках, 3-6 октября 2012, Пермь, С. 114-115.

На пятом этапе выполнения работы в 2012 г. в диссертационный совет Д 212.285.02 по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой

степени доктора наук на базе ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» представлена диссертация Малыгина А.П. на тему «Нелинейный тепломассоперенос в процессах затвердевания и испарения с двухфазной зоной» (научный консультант: Александров Д.В.) на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника.

На пятом этапе выполнения работы в 2012 г. в диссертационный совет Д 212.285.13 по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук на базе ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» представлена диссертация Зверева В.С. на тему «Математическое моделирование поверхностной диффузии с фронтальной химической реакцией» (научный руководитель: Иванов А.О.) на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

### Список использованных источников

1. Buffett B.A. Earth's core and the geodynamo // Science, 2007. - Vol. 288. - P. 2007-2012.
2. Takehiro S.-I. Fluid motions induced by horizontally heterogeneous Joule heating in the Earth's inner core // Phys. Earth Planet. Inter., 2011. - Vol. 184. - P. 134-142.
3. Cao A., Romanowicz B. Hemispherical transition of seismic attenuation at the top of the earth's inner core // Earth Planet Sci. Lett., 2004. - Vol. 228. - P. 243-253.
- 4 Gubbins D. et al. Gross thermodynamics of two-component core convection // Geophys. J. Int., 2004. - Vol. 157. - P. 1407-1414.
5. Fearn D., Loper D.E., Roberts P.H. Structure of the Earth's inner core // Nature, 1981. - Vol. 292. - P. 232-233.
- 6 Glatzmaier G.A., Roberts P.H. A three-dimensional convective dynamo solution with rotating and finitely conducting inner core and mantle // Phys. Earth Planet. Inter., 1995. - Vol. 91. - P. 63 -75.
- 7 Glatzmaier G.A., Roberts P.H. Simulating the geodynamo // Contemp. Phys., 1997. - Vol. 38. - P. 269-288.
8. Braginsky S.I., Roberts P.H. Equations governing convection in earth's core and the geodynamo // Geophys. Astrophys. Fluid Dyn., 1995. - Vol. 79. - P. 1-97.
9. Starchenko S.V., Jones C.A. Typical velocities and magnetic field strengths in planetary interiors // ICARUS, 2002. - Vol. 157. - P. 426-435.
10. Starchenko S.V. Supercritical magnetoconvection in rapidly rotating planetary cores // Phys. Earth Planet. Int., 2000. - Vol. 117. - P. 225-235.
11. Старченко С.В., Котельникова М.С. Симметричный тепломассоперенос во вращающемся сферическом слое // ЖЭТФ, 2002. - Т. 121, вып. 3. - С. 538-550.

12. Котельникова М.С., Старченко С.В. Тепломассоперенос в убывающем жидком ядре Земли // Физика Земли, 2003, N 11. - С. 54-63.
13. Александров Д.В., Малыгин А.П. Комментарий к статье "Симметричный тепломассоперенос во вращающемся сферическом слое", ЖЭТФ, том 121, вып. 3, 2002 // ЖЭТФ, 2012. - Т. 141, вып. 2. - С. 292-293.
14. Lister J.R., Buffett B.A. The strength and efficiency of thermal and compositional convection in the geodynamo // Phys. Earth Planet. Int., 1995. - Vol. 91. - P. 17-30.
15. Glatzmaier G.A., Roberts P.H. An anelastic evolutionary geodynamo simulation driven by compositional and thermal convection // Physica D, 1996. - Vol. 97. - P. 81-94.
16. Dziewonski A.M., Anderson D.L. Preliminary reference Earth model // Phys. Earth Planet. Int., 1981. - Vol. 25. - P. 297-356.
17. Anufriev A.P., Jones C.A. Soward, A.M. The Boussinesq and anelastic liquid approximations for convection in the Earth's core // Phys. Earth Planet. Int., 2005. - Vol. 152. - P. 163-190.
18. Anufriev A.P., Cupal I. Characteristic amplitudes in the solution of the anelastic geodynamo model // Phys. Earth Planet. Int., 2001. - Vol. 124. - P. 167-174.
19. Loper, D.E. A model of the dynamical structure of Earth's outer core // Phys. Earth Planet. Inter., 2000. - Vol. 117. - P. 179-196.
20. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Coupled convective and morphological instability of the inner core boundary of the Earth // Phys. Earth Planet. Int., 2011. - Vol. 189. - P. 134-141.
21. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Flow-induced morphological instability and solidification with the slurry and mushy layers in the presence of convection // Int. J. Heat Mass Trans., 2012. - Vol. 55. - P. 3196-3204.
22. Асеев Д.Л., Александров Д.В. Нелинейная динамика затвердевания бинарного расплава с неравновесной двухфазной зоной // Доклады АН, 2006. - Т. 408. - С. 609-613.



23. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Directional solidification of binary melts with a non-equilibrium mushy layer // Int. J. Heat Mass Trans., 2006. - Vol. 49. - P. 4903-4909.
24. Александров Д.В. К теории затвердевания с квазиравновесной двухфазной зоной // Доклады АН, 2000. - Т. 375, N 2. - С. 172-176.
25. Alexandrov D.V. Solidification with a quasiequilibrium mushy zone: exact analytical solution // Int. J. Fluid Mech. Res., 2000. - Vol. 27, N 2-4. - P. 213-222.
26. Alexandrov D.V. Solidification with a quasiequilibrium mushy region: exact analytical solution of nonlinear model // J. Crystal Growth, 2001. - Vol. 222. - P. 816-821.
27. Alexandrov D.V. Solidification with a quasiequilibrium two-phase zone // Acta Mater., 2001. - Vol. 49. - P. 759-764.
28. Worster M.G., Wettlaufer J.S. Natural convection, solute trapping, and channel formation during solidification of saltwater // J. Phys. Chem B, 1997. - Vol. 101. - P. 6132-6136.
29. Solomon T.H., Hartley R.R., Lee A.T. Aggregation and chimney formation during the solidification of ammonium chloride // Phys. Rev. E., 1999. - Vol. 60. - P. 3063-3071.
30. Worster, M.G. Natural convection in a mushy layer // J. Fluid Mech., 1991. - Vol. 224. - P. 335-359.
31. Katz, R.F., Worster, M.G., 2008. Simulation of directional solidification, thermochemical convection, and chimney formation in a Hele-Shaw cell. J. Comp. Phys. 227, 9823-9840.
32. Deguen R., Alboussi\`ere T., Brito D. On the existence and structure of a mush at the inner core boundary of the Earth // Phys. Earth Planet. Int., 2007. - Vol. 164. - P. 36-49.
33. Mullins W.W., Sekerka R.F. Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy // J. Appl. Phys., 1964. - Vol. 35, N 2. - P. 444-451.
34. Buyevich Yu.A., Alexandrov D.V., Mansurov V.V. Macrokinetics of crystallization. - New York: Begell House, Inc., 2001.

35. Shimizu H., Poirier J.P., Le Moué J.L. On crystallization at the inner core boundary // Phys. Earth Planet. Int., 2005. - Vol. 151. - P. 37-51.
36. Loper D.E. Structure of the inner core boundary // Geophys. Astrophys. Fluid Dyn., 1983. - Vol. 25. - P. 139-155.
37. Александров Д.В., Асеев Д.Л., Малыгин А.П. К теории процессов затвердевания с неравновесной двухфазной зоной // Расплавы, 2011, N 1. - С. 16-30.
38. Batchelor G.K. Transport properties of two-phase materials with random structure // Ann. Rev. Fluid Mech., 1974. - Vol. 6. - P. 227-255.
39. Scheil E. Bemerkungen zur schichtkristallbildung // Zeitschrift für Metallkunde, 1942. - Vol. 34. - P. 70-72.
40. Alexandrov D.V., Malygin A.P., Alexandrova I.V. Solidification of leads: approximate solutions of non-linear problem // Ann. Glaciol., 2006. - Vol. 44. - P. 118-122.
41. Kerr R.C., Woods A.W., Worster M.G., Huppert H.E. Solidification of an alloy cooled from above. Part 1. Equilibrium growth // J. Fluid Mech., 1990. - Vol. 216. - P. 323-342.
42. Alexandrov, D.V., Nizovtseva, I.G. To the theory of underwater ice evolution, or nonlinear dynamics of "false bottoms" // Int. J. Heat Mass Trans., 2008. - Vol. 51. - P. 5204-5208.
43. Флемингс М.К. Процессы затвердевания. - М.: Мир, 1977. - 423 с.
44. Zeldovich Ya.B. On the theory of formation of a new phase. Cavitation // Zh. Eksperiment. Tekhnich. Fiz., 1942. - Vol. 12. - P. 525-536.
45. Frenkel J. Kinetic theory of liquids. - New York: Dover, 1955.
46. Чернов А.А., Гиваргизов Е.И., Багдасаров Х.С. Современная кристаллография. Т. 3. Образование кристаллов. - М.: Наука, 1980, 370 с.

47. Федорюк М.В. Асимптотические методы для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений. - М.: Наука, 1983. - 352 с.
48. Найфэ А.Х. Методы возмущений. - М.: Мир, 1976.
49. Борисов В.Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка.- М.: Metallurgy, 1987. - 224 с.
50. Борисов В.Т., Матвеев Ю.Е. Определение температур в начале двухфазной зоны бинарных сплавов // ФММ, 1962. - Т. 13, N 3. - С. 456-470.
51. Борисов В.Т., Виноградов В.В., Тяжельникова И.Л. Квазиравновесная теория двухфазной зоны и ее применение к затвердеванию сплавов // Изв. Вузов, Черная металлургия. - 1977, N 5. - С. 127-134.
52. Hills R.N., Loper D.E., Roberts P.H. A thermodynamically consistent model of a mushy zone // Q. Jl Mech. appl. Math., 1983. - Vol. 36, Pt. 4. - P. 505-539.
53. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Convective instability of directional crystallization in a forced flow: The role of brine channels in a mushy layer on nonlinear dynamics of binary systems // Int. J. Heat Mass Transf., 2011. - Vol. 54. - P. 1144-1149.
54. Fowler A.C. The formation of freckles in binary alloys // IMA Journal of Applied Mathematics, 1985. - Vol. 35. - P. 159-174.
55. Bear J. Dynamics of fluids in porous media. - New York: Elsevier Sci., 1972.
56. Schulze T.P., Worster M.G. Weak convection, liquid inclusions and the formation of chimneys in mushy layers // J. Fluid Mech., 1999. - Vol. 388. - P. 197-215.
57. Chung C.A., Worster M.G. Steady-state chimneys in a mushy layer // J. Fluid Mech., 2002.- Vol. 455. - P. 387-411.

58. Butler S.L., Huppert H.E., Worster M.G. Numerical modelling of convection in a reactive porous medium with a mobile mush-liquid interface // J. Fluid Mech., 2006. - Vol. 549. - P. 99-129.
59. Carmen P.C. Permeability of saturated sands, soils and clays // J. Agric. Sci., 1939. - Vol. 29. - P. 262-273.
60. Stacey F.D., Loper D.E. The thermal boundary layer interpretation of D" and its role as a plume source // Phys. Earth Planet. Int., 1983. - Vol. 33. - P. 45-55.
61. Lowes F.J. The geomagnetic dynamo - Elementary energetics and thermodynamics // Geophys. Surv., 1984. - Vol. 7. - P. 91-105.
62. Loper D.E. Dynamo energetics and the structure of the outer core // Geophys. Astrophys. Fluid Dyn., 1989. - Vol. 49. - P. 213-219.
63. Roberts P.H., Loper D.E. Towards a theory of the structure of a dendrite layer // in Stellar and Planetary Magnetism, Ed. Soward A.M. - London: Gordon and Breach, 1983, P. 329-349.
64. Bergman M.I., Fearn D.R., Bloxham J., Shannon M.C. Convection and channel formation in solidifying Pb-Sn alloys // Metall. Mat. Trans. A, 1997.- Vol. 28A.- P. 859-866.
65. Worster M.G. Convection in mushy layers // Annu. Rev. Fluid. Mech., 1997. - Vol. 29.- P. 91-122.
66. Wettlaufer J.S., Worster M.G., Huppert H.E. Natural convection during solidification of an alloy from above with application to the evolution of sea ice // J. Fluid Mech., 1997. - Vol. 344. - P. 291-316.
67. Schulze T.P., Worster M.G. A numerical investigation of steady convection in mushy layers during the directional solidification of binary alloys // J. Fluid Mech., 1998. - Vol. 356. - P. 199-220.
68. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Unidirectional solidification with a mushy layer. The influence of weak convection // Acta Mater., 2006. - Vol. 54. - P. 2401-2406.

69. Sumita I., Bergman M.I. Inner-core dynamics // in Treatise on Geophysics, Ed. Schubert G.-Elsevier, 2007. - Vol. 8. - P. 299-318.
70. Melchior P. The Physics of the Earth's Core. - Oxford: Pergamon, 1986.
71. Officer C.B. A conceptual model of core dynamics and the Earth's magnetic field // J. Geophys., 1986. - Vol. 59. - P. 89-97.
72. Poirier J.P. Transport properties of liquid metals and viscosity of the Earth's core // Geophys. J. Int., 1988. - Vol. 92. - P. 99-105.
73. de Wijs G.A. et al. The viscosity of liquid iron at the physical conditions of the Earth's core // Letters to Nature, 1998. - Vol. 392. - P. 805-807.
74. Александров Д.В., Галенко П.К., Малыгин А.П., Херлах Д.М. Отбор устойчивого режима роста вершины параболического дендрита при вынужденном конвективном течении и кристаллизации бинарной жидкости // Вестн. Удмурт. Ун-та, 2010. - Т. 1. - С. 3-16.
75. Alexandrov D.V., Galenko P.K., Herlach D.M. Selection criterion for the growing dendritic tip in a non-isothermal binary system under forced convective flow // J. Cryst. Growth, 2010. - Vol. 312. - P. 2122-2127.
76. Pelce P. Dynamics of curved fronts. - Boston: Academic Press, 1988.
77. Pelce P., Bensimon D. Theory of dendrite dynamics // Nucl. Phys. B, 1987. - Vol. 2. - P. 259-270.
78. Ben Amar M., Pelce P. Impurity effect on dendritic growth // Phys. Rev. A., 1989. - Vol. 39. - P. 4263-4269.
79. Bouissou Ph., Pelce P. Effect of a forced flow on dendritic growth // Phys. Rev. A, 1989. - Vol. 40. - P. 6673-6680.

80. Bouissou Ph., Perrin B., Tabeling P. Influence of an external flow on dendritic crystal growth // Phys. Rev. A, 1989. - Vol. 40. - P. 509-512.

81. Bergman M.I. Estimates of the Earth's inner core grain size // Geophys. Res. Lett., 1998. - Vol. 25. - P. 1593-1596.

Копии опубликованных на заключительном этапе статей

РАСПЛАВЫ

6 • 2012

УДК 536.421.4

© 2012 г. А. П. Малыгин, Д. В. Александров<sup>1</sup>**КОНВЕКТИВНАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ФРОНТА ЗАТВЕРДЕВАНИЯ.  
МОДЕЛИ ДВУХФАЗНОЙ ЗОНЫ**

Проведен линейный анализ конвективной морфологической устойчивости плоской границы раздела твердой и жидкой фаз при наличии вытеснения примеси фронтом и рассмотрении нелинейной фазовой диаграммы системы. Показано, что присутствие конвекции приводит к существованию областей устойчивого и неустойчивого затвердевания при наличии в системе концентрационного переохлаждения. Первая из этих ситуаций соответствует двухфазной зоне, заполненной растущими на примесях частицами твердой фазы, а вторая ситуация характеризует область фазового перехода, состоящую из дендритоподобных структур. Сформулирована обобщенная математическая модель процесса и определены ее аналитические решения, соответствующие квазиравновесной и слабонеравновесной областям фазового перехода с конвекцией.

*Ключевые слова:* конвекция, морфологическая неустойчивость, задача Стефана, затвердевание, двухфазная зона.

**ВВЕДЕНИЕ**

Форма и временная эволюция межфазной границы кристалл–расплав целиком и полностью определяют характер примесного распределения в твердой фазе [1–3]. Вследствие этого, задача о морфологической устойчивости границы раздела фаз — одна из наиболее важных задач теории кристаллизации. Так, в случае движения плоского фронта затвердевания с постоянной скоростью эта задача впервые была решена в классической работе В. Маллинза и Р. Секерки [4], а затем детализирована в публикациях [5, 6].

Изменения морфологии фронта затвердевания, в частности, обусловлены понижением температуры фазового перехода, которое вызвано вытеснением примеси фронтом кристаллизации в глубь расплава и явлением концентрационного переохлаждения, создающими благоприятные условия для преимущественного роста определенных выступов твердой фазы в переохлажденную жидкость системы. Поэтому форма межфазной поверхности оказывает фундаментальное влияние на распределение примеси в растущем кристалле. Последнее же полностью определяет неоднородности примесных структур и дефекты в твердом слитке [7]. Изменением скорости кристаллизации, количества примеси, условий охлаждения и др. можно получать вещества с различными структурами, что, несомненно, и определяет разные механические, физические и химические свойства материалов.

При анализе морфологической неустойчивости В. Маллинзом и Р. Секеркой был использован подход, фактически аналогичный рассмотренному Л.Д. Ландау по гидродинамике горения [8]. Они налагали на плоскую поверхность раздела между твердой фазой и расплавом малое синусоидальное возмущение, ссылаясь на то обстоятельство, что такое возмущение можно разложить в интеграл Фурье. Этот подход является строгим, и полученный критерий неустойчивости можно считать правильным. Авторам работы [4] методами линейной теории неустойчивости удалось показать, что при определенных соотношениях между параметрами, характеризующими процесс кристаллизации, воз-

<sup>1</sup>Dmitri.Alexandrov@usu.ru.



можно нарушение морфологической устойчивости процесса затвердевания относительно квазистационарного режима движения фронта с постоянной скоростью. Однако в работе [4] (а также в [9]), где исследовались условия образования ячеистой структуры, при анализе существенно нестационарных возмущений использовалось некорректное предположение о стационарности поля концентрации, что неправомерно [10].

Этот недостаток был исправлен, в частности, в работах [11, 12]. В них было показано, что без использования предположения о стационарности поля концентрации в выражении для знаменателя инкремента возмущений появляются два дополнительных слагаемых. Однако выражение для знаменателя инкремента возмущений оказалось знакопостоянным и критерий устойчивости, найденный В. Маллинзом и Р. Секеркой, является правильным, что подтвердили теоретические [5, 6, 13–15] и экспериментальные [16, 17] работы. Далее, последовала целая серия статей различных авторов, которые исследовали морфологическую неустойчивость для разных условий затвердевания (изучалось влияние конвекции [18–21], эффектов термодиффузии [22, 23], периодичности скорости роста [24], кинетических факторов и анизотропии [25, 26], высокоскоростной кристаллизации [27, 28] и автомодельности процесса [29–31]). Анализ неустойчивости, развитый Маллинзом и Секеркой, также используется для определения отборного соотношения для скорости роста изолированного дендрита [32, 33] и нахождения условий устойчивого роста межфазной границы между двухфазной областью и расплавом [34–39].

Основной вывод работ по морфологической неустойчивости заключается в том, что при определенном соотношении между температурным и концентрационным градиентами, а также теплофизическими характеристиками расплава плоский фронт теряет устойчивость по отношению к малым возмущениям его формы. Неустойчивыми преимущественно являются длинноволновые возмущения, на которые силы поверхностного натяжения не оказывают стабилизирующего влияния. Нарушение морфологической устойчивости приводит к формированию сложных ростовых структур перед границей фазового перехода. Другими словами, перед этой границей формируется слой смешанного состояния твердой и жидкой фаз, называемый двухфазной зоной [40, 41].

Вытеснение примеси растущей границей раздела твердой и жидкой фаз приводит к ее накоплению в жидкости перед фронтом, вследствие чего в определенный момент времени возникает концентрационное переохлаждение [42]. Это переохлаждение и оказывается теплофизической причиной нарушения морфологической устойчивости фронта. Отметим, что, в соответствии с модельными расчетами, такое переохлаждение в реальных системах возникает достаточно быстро после начала затвердевания [43–46]. На практике критерии концентрационного переохлаждения и морфологической неустойчивости не дают существенно разных результатов. Однако первый из них является физической причиной второго [47]. Переохлаждение и неустойчивость приводят к образованию сложных ростовых структур (в том числе и дендритных) твердой фазы в расплаве. Здесь же могут идти процессы нуклеации частиц на растворенных примесях. Таким образом, перед фронтом возникает протяженная область фазового перехода.

В целом, растущая твердая фаза будет приводить к уменьшению переохлаждения в этой области за счет выделения скрытой теплоты затвердевания. Если твердая фаза выделяет достаточное количество теплоты для полной компенсации переохлаждения, то процесс будет описываться с помощью теории квазиравновесной двухфазной зоны [40, 41].

Теория кристаллизации с такой областью фазового перехода интенсивно исследовалась в последние годы (в [48–52] построены аналитические решения, описывающие квазистационарный процесс двух- и трехкомпонентных систем, в [53–55] развиты методы нахождения решений для автомодельной двухфазной зоны, а в [56–58] разработана теория нестационарной кристаллизации с областью фазового перехода). Если переохлаждение в полном объеме не снимается в результате тепловыделения, двухфазная зона остается переохлажденной. Теория кристаллизации с такой областью фазового перехода требует учета процессов нуклеации, роста и последующего взаимодействия ча-



стиц твердой фазы. Без учета процессов коагуляции, агломерации, перегонки и Оствальдова созревания такая теория была развита в работах [59–61].

Настоящая работа посвящена определению условий возникновения режимов затвердевания с ветвящимися дендритоподобными структурами и зарождающимися растущими частицами в переохлажденной области фазового превращения при наличии конвекции в расплаве.

### КОНВЕКТИВНАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ФРОНТА

Рассмотрим процесс направленного затвердевания плоского фронта вдоль пространственной оси  $z$ . Твердая фаза и расплав соответственно занимают области  $z < 0$  и  $z > 0$ . В твердой фазе выполняется классическое уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial t} - V \frac{\partial \theta_s}{\partial z} = a_s \nabla^2 \theta_s, \quad (1)$$

где второе слагаемое в левой части (1) учитывает то обстоятельство, что уравнение записано в системе координат фронта кристаллизации, движущегося с постоянной скоростью  $V$  вдоль положительного направления оси  $z$ . Здесь  $\theta_s$  обозначает температуру твердой фазы,  $a_s$  – коэффициент температуропроводности в твердой фазе, а  $t$  – время. Диффузией примеси в твердой фазе будем, как это принято, пренебрегать. В расплавленной фазе выполняются следующие конвективные уравнения теплопроводности и диффузии примеси:

$$\frac{\partial \theta_l}{\partial t} - V \frac{\partial \theta_l}{\partial z} + \vec{u} \cdot \nabla \theta_l = a_l \nabla^2 \theta_l, \quad \frac{\partial \sigma_1}{\partial t} - V \frac{\partial \sigma_1}{\partial z} + \vec{u} \cdot \nabla \sigma_1 = D_c \nabla^2 \sigma_1, \quad (2)$$

где  $\theta_l$  и  $\sigma_1$  – температура и концентрация примеси в расплаве,  $\vec{u}$  – вектор скорости течения расплава,  $a_l$  и  $D_c$  – соответственно коэффициенты температуропроводности и диффузии примеси в расплаве.

Температура на фронте кристаллизации  $z = 0$  непрерывна и равна температуре фазового перехода, зависящей от температуры затвердевания чистого вещества  $\theta_m$ , концентрации примеси и коэффициента  $\Gamma$ , определяемого поверхностной энергией  $\gamma$ :

$$\theta_l = \theta_s = \theta_m + f_0(\sigma_1) + \Gamma \nabla^2 h', \quad \Gamma = \frac{\theta_m \gamma}{L_V}. \quad (3)$$

Здесь  $L_V$  скрытая теплота затвердевания;  $f_0(\sigma_1)$  – функция концентрации примеси, получаемая из фазовой диаграммы (в линейном случае  $f_0(\sigma_1) = m_c \sigma_1$ ,  $m_c$  – коэффициент наклона линии ликвидуса);  $h'$  – отклонения плоского фронта от своего невозмущенного положения  $z = 0$ .

Кроме того, на фронте кристаллизации  $z = 0$  выполняются соотношения баланса тепла и массы

$$(\lambda_s \nabla \theta_s - \lambda_l \nabla \theta_l) \vec{n} = L_V \vec{v} \cdot \vec{n}, \quad (1 - k) \sigma_1 \vec{v} \cdot \vec{n} + D_c \nabla \sigma_1 \cdot \vec{n} = 0, \quad (4)$$

где  $\lambda_s$  и  $\lambda_l$  – коэффициенты теплопроводности твердой и жидкой фаз;  $\vec{n}$  – вектор нормали к фронту, направленный в расплав;  $k$  – равновесный коэффициент распределения примеси;  $\vec{v} \cdot \vec{n} \approx V + \partial h' / \partial t$  – нормальная компонента скорости.

Граничные условия (4) позволяют выразить градиенты температуры в твердой фазе ( $G_s$ ) и концентрации примеси ( $G_c$ ) при  $z = 0$  через скорость  $V$  и температурный градиент в расплаве  $G_l$ :

$$G_s = \frac{L_V V + \lambda_l G_l}{\lambda_s}, \quad G_c = \frac{(k - 1) \sigma_0 V}{D_c}. \quad (5)$$

Здесь  $\sigma_0$  представляет собой концентрацию примеси при  $z = 0$ .

Для линейного анализа устойчивости потребуются вторые производные температуры и концентрации на фронте затвердевания. Они могут быть найдены из уравнений (1) и (2) в виде

$$\frac{d^2\theta_s}{dz^2} = -\frac{G_s V}{a_s}, \quad \frac{d^2\theta_l}{dz^2} = -\frac{G_l V}{a_l}, \quad \frac{d^2\sigma_l}{dz^2} = -\frac{(k-1)V^2\sigma_0}{D_c^2}. \quad (6)$$

Предположим, что плоская граница раздела твердой и жидкой фаз испытывает возмущение  $h' = h_1 \exp(\omega t + ik_x x + ik_y y)$ , где  $\omega$  – частота возмущений,  $i$  – мнимая единица, а  $k_x$  и  $k_y$  – волновые числа по направлениям  $x$  и  $y$ . Это возмущение создает соответствующие возмущения температурного и концентрационного полей  $\theta'_s = \theta_{s1} \exp(\omega t + ik_x x + ik_y y + \beta_s z)$ ,  $\theta'_l = \theta_{l1} \exp(\omega t + ik_x x + ik_y y + \beta_l z)$ ,  $\sigma'_l = \sigma_{l1} \exp(\omega t + ik_x x + ik_y y + \beta_l z)$ . Здесь штрих над буквой обозначает возмущенную величину, а нижний индекс “1” характеризует амплитуды соответствующих возмущений. Раскладывая граничные условия (3) и (4) в ряды в окрестности точки  $z = 0$  и подставляя возмущенные значения температуры, концентрации и координаты межфазной границы, находим четыре уравнения, связывающие между собой амплитуды возмущений

$$\begin{aligned} \theta_{l1} + \left( G_l - G_c \left( \frac{df_0}{d\sigma_l} \right)_{\sigma_l=\sigma_0} + \Gamma k_h^2 \right) h_1 - \sigma_{l1} \left( \frac{df_0}{d\sigma_l} \right)_{\sigma_l=\sigma_0} &= 0, \quad k_h = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \\ \lambda_s \beta_s \theta_{s1} - \lambda_l \beta_l \theta_{l1} + \left( \frac{V \lambda_l G_l}{a_l} - \frac{V \lambda_s G_s}{a_s} - L_V \omega \right) h_1 &= 0, \\ \theta_{s1} + (G_s - G_l) h_1 - \theta_{l1} &= 0, \\ \frac{V k G_c + \omega(k-1)\sigma_0}{D_c} h_1 - \left( \frac{V(1-k)}{D_c} + \beta \right) \sigma_{l1} &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Далее, подстановка возмущений в уравнения (1) и (2) при  $z = 0$  дает выражения для определения неизвестных коэффициентов  $\beta_s$ ,  $\beta_l$  и  $\beta$ :

$$\begin{aligned} \beta_s &= -\frac{V}{2a_s} \left( 1 - \sqrt{\frac{4(\omega a_s + k_h^2 a_s^2)}{V^2} + 1} \right), \quad [\omega - V\beta_l + a_l(k_h^2 - \beta_l^2)] \theta_{l1} + G_l U_z h_1 = 0, \\ [\omega - V\beta + D_c(k_h^2 - \beta^2)] \sigma_{l1} + G_c U_z h_1 &= 0, \quad U_z = -\left( \frac{\partial u_z}{\partial z} \right)_{z=0}, \end{aligned} \quad (8)$$

Из выражений (7) и (8) находим явный вид коэффициентов  $\beta_l$  и  $\beta$ :

$$\begin{aligned} \beta_l &= -\frac{V}{2a_l} \left( 1 + \sqrt{\frac{4}{V^2} \left( \omega a_l + k_h^2 a_l^2 + \frac{G_l U_z a_l}{B} \right) + 1} \right), \\ \beta &= -\frac{V/D_c - v_0}{2} \left( 1 + \sqrt{\frac{4[k_h^2 + v_0(1-k)V/D_c + \omega/D_c]}{(V/D_c - v_0)^2} + 1} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь введены обозначения

$$\begin{aligned} B &= -\Gamma k_h^2 - G_l + \left[ \frac{V k G_c + \omega(k-1)\sigma_0}{\beta D_c + (1-k)V} + G_c \right] \left( \frac{df_0}{d\sigma_l} \right)_{\sigma_l=\sigma_0}, \\ v_0 &= \frac{G_c U_z}{V k G_c + \omega(k-1)\sigma_0}. \end{aligned}$$

Отметим, что формулы (8) и (9) переходят в аналогичные соотношения из [62] при  $U_z = 0$ , где учет конвекции был выполнен лишь частично (в этой работе концентрационное поле на границе  $z = 0$  претерпевало разрыв, а уравнения переноса тепла и массы возмущались без учета конвективных слагаемых).

Исключая теперь амплитуды возмущений  $\theta_{s1}$ ,  $\theta_{l1}$ ,  $\sigma_{l1}$  и  $h_1$  из граничных условий (7), получаем дисперсионное выражение следующего вида:

$$\Omega_1(\omega, k_h) - \omega \Omega_2(\omega, k_h) = 0, \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} \Omega_1(\omega, k_h) &= -\alpha_s G_s - \alpha_l G_l - \Gamma k_h^2 + \alpha G_c \left( \frac{df_0}{d\sigma_1} \right)_{\sigma_1=\sigma_0}, \\ \Omega_2(\omega, k_h) &= \frac{Ly}{\beta_s \lambda_s - \beta_l \lambda_l} - \frac{G_c D_c / V^2}{1 - k + \beta D_c / V} \left( \frac{df_0}{d\sigma_1} \right)_{\sigma_1=\sigma_0}, \\ \alpha_s &= -\frac{\lambda_s (V + \beta_s a_s)}{a_s (\beta_l \lambda_l - \beta_s \lambda_s)}, \quad \alpha_l = \frac{\lambda_l (V + \beta_l a_l)}{a_l (\beta_l \lambda_l - \beta_s \lambda_s)}, \quad \alpha = \frac{V + \beta D_c}{\beta D_c + (1 - k)V}. \end{aligned}$$

Выражение (10) также имеет предельный переход при  $U_z = 0$  к теории, развитой в работе [62].

Произведем теперь оценку основного параметра, выражающего влияние конвекции на устойчивость процесса кристаллизации — скорости растяжения (или растягивающего течения)  $U_z$ . Обозначим этот параметр в окрестности границы твердая фаза — расплав через отношение  $\bar{u}_z / \bar{z}$ , где  $\bar{u}_z$  представляет собой характерную скорость расплава в окрестности точки  $z = 0$ , а  $\bar{z}$  обозначает характерный масштаб длины. Оценим характерное расстояние как масштаб неровностей возмущений на фронте затвердевания, который по порядку величины близок к радиусу вершины дендрита  $\bar{z} \sim 10^{-5}$  м [32, 33]. В случае достаточно интенсивной конвекции можно считать, что  $\bar{u}_z$  меньше или порядка  $10^{-4}$  м/с (здесь не рассматривается случай доминирующей над процессом конвекции [63], когда концентрационное переохлаждение перестает играть существенной роли). Таким образом, для  $U_z$  имеем следующую порядковую оценку:  $-10 < U_z < 10 \text{ с}^{-1}$ .

На рис. 1 и 2 приведены кривые нейтральной устойчивости  $\omega = 0$  для двух сплавов, теплофизические свойства которых по данным работы [44] приведены в таблице. Эти кривые, построенные на основе дисперсионного закона (10), показывают доминирующую роль скорости растяжения на формирование режима устойчивого или неустойчивого затвердевания. Важно, что области устойчивости и неустойчивости являются переохлажденными, т.е. в них выполняется условие концентрационного переохлаждения  $G_l - m_c G_c < 0$ . Это означает, что концентрационно переохлажденный расплав может затвердевать с устойчивой межфазной границей и с развивающимися на ней неустойчивостями, растущими в глубь холодной жидкости. Первый из этих двух режимов затвердевания, реализуемый в области всевозможных длин волн при  $U_z > U_{cr}$  ( $U_{cr}$  — критическое значение скорости растяжения, соответствующее точкам максимума на рис. 1 и 2), характеризуется процессами нуклеации твердой фазы на растворенных примесях и ее последующим ростом с частичной компенсацией переохлаждения области фазового перехода в результате выделения скрытой теплоты кристаллизации. Второй режим затвердевания, формирующийся в области  $U_z < U_{cr}$ , описывается возникновением неустойчивости плоского фронта, которая приводит к образованию сложных дендритоподобных структур в области фазового перехода, также частично компенсирующих переохлаждение. Подчеркнем, что при заданных параметрах процесса безконвективный

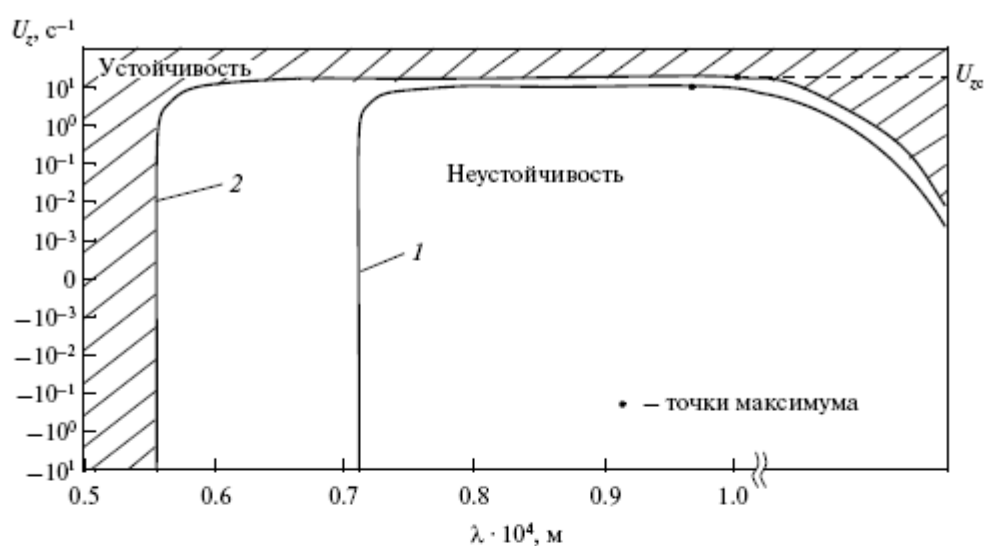


Рис. 1. Кривые нейтральной устойчивости при различных значениях концентрации примеси на фронте  $\sigma_0 = 3$  (1) и 5 мас. % (2) для сплава Al–Cu, теплофизические свойства которого приведены в таблице. Области устойчивости и неустойчивости соответственно лежат выше и ниже каждой из кривых,  $V = 10^{-6}$  м/с. Область устойчивости для кривой 2 заштрихована.

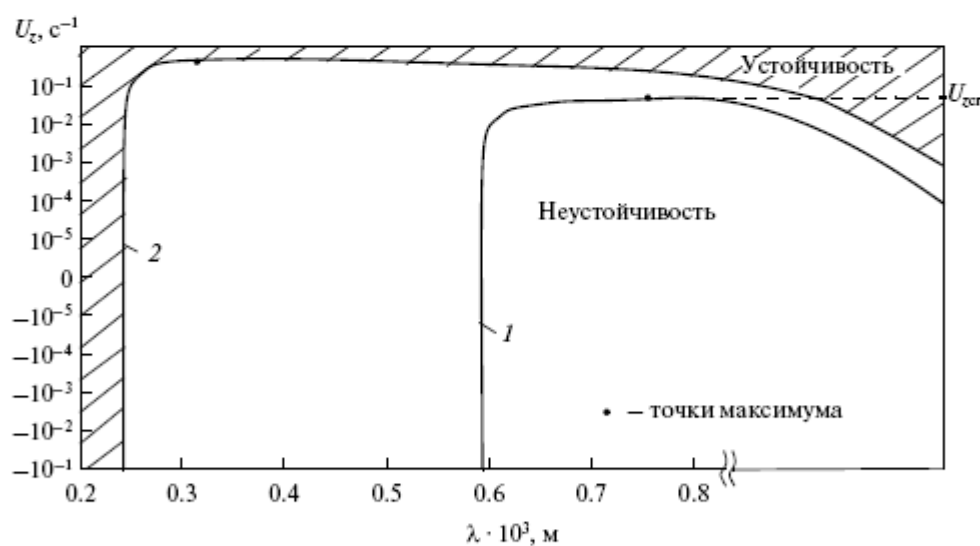


Рис. 2. Кривые нейтральной устойчивости при различных значениях концентрации примеси на фронте  $\sigma_0 = 2$  (1) и 7 мас. % (2) для сплава Fe–Ni, теплофизические свойства которого приведены в таблице. Области устойчивости и неустойчивости соответственно лежат выше и ниже каждой из кривых,  $V = 10^{-7}$  м/с. Область устойчивости для кривой 2 заштрихована.

сценарий кристаллизации  $U_z = 0$  соответствует возникновению неустойчивости. Важный момент: нуклеация и рост частиц возникают при  $U_z > U_{zc} > 0$  (т.е. в регионах опускающегося расплава, когда  $u_z < 0$ ). Этот результат соответствует качественным аргументам работы [64], где физический вывод делается на основе анализа композиционных сил.

Теплофизические характеристики сплавов Al–Cu и Fe–Ni

Параметры сплава	Al–Cu	Fe–Ni	Единицы измерения
Коэффициент диффузии примеси $D_c$	$5 \cdot 10^{-9}$	$5 \cdot 10^{-9}$	$\text{м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$
Коэффициент температуропроводности:			
$a_1$ в расплаве	$0,9 \cdot 10^{-4}$	$1,4 \cdot 10^{-5}$	$\text{м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$
$a_s$ в твердой фазе	$2,1 \cdot 10^{-4}$	$4,4 \cdot 10^{-5}$	$\text{м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$
Коэффициент теплопроводности:			
$\lambda_1$ в расплаве	91	41,9	$\text{Дж} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$
$\lambda_s$ в твердой фазе	211	74	$\text{Дж} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$
Коэффициент распределения примеси $k$	0,17	0,68	—
Скрытая теплота затвердевания $L_V$	$1,2 \cdot 10^9$	$1,4 \cdot 10^{10}$	$\text{Дж} \cdot \text{м}^{-3}$
Плотность расплава $\rho_1$	$2,7 \cdot 10^3$	$7 \cdot 10^3$	$\text{кг} \cdot \text{м}^{-3}$
Плотность твердой фазы $\rho_s$	$2,7 \cdot 10^3$	$7 \cdot 10^3$	$\text{кг} \cdot \text{м}^{-3}$
Коэффициент $\Gamma$	$1,6 \cdot 10^{-7}$	$1,6 \cdot 10^{-7}$	$\text{К} \cdot \text{м}$
Температурный градиент в расплаве $G_1$	5	5	$\text{К} \cdot \text{м}^{-1}$
Наклон ликвидуса, $m_c$	–2,5	–2,65	$\text{К} \cdot \text{мас. \%}^{-1}$

Главный вывод, следующий из рис. 1 и 2, заключается в том, что оба упомянутых выше сценария кристаллизации, соответствующие образованию частиц твердой фазы и дендритных структур в двухфазной зоне, вполне возможны при различных параметрах процесса. Более того, оба режима затвердевания могут, по-видимому, сосуществовать. Другими словами, эволюция дендритоподобных структур в переохлажденной двухфазной области может сопровождаться ростом частиц, нуклеирующих и претерпевающих последующий рост на примесных включениях. Ниже рассматривается нелинейная модель такого процесса кристаллизации и приводятся ее аналитические решения, описывающие предельные режимы процесса со слабо неравновесной и квазиравновесной двухфазными зонами.

#### ОБЛАСТЬ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Рассмотрим процесс кристаллизации при наличии протяженной области фазового превращения перед границей твердая фаза – переохлажденная зона. Выберем начало отсчета  $z = 0$  движущейся с постоянной скоростью  $V$  системы координат на границе расплав–двухфазная область. Противоположная граница  $z = -\delta$  соответствует межфазной поверхности твердое тело – двухфазная зона. Уравнения диффузии примеси и теплопроводности в слое толщины  $\delta$ , зависящие от доли твердой фазы  $\varphi$ , имеют вид

$$(1 - \varphi) \frac{\partial \sigma}{\partial t} + u(1 - \varphi) \cdot \nabla \sigma = \nabla [D(\varphi) \nabla \sigma] + (1 - k) \sigma \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} + u_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right), \quad (11)$$

$$\rho(\varphi) c(\varphi) \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho_1 c_1 (1 - \varphi) u \cdot \nabla \theta = \nabla (\lambda_{sl}(\varphi) \nabla \theta) + L_V \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} + u_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right), \quad (12)$$

где  $\sigma$  и  $\theta$  – концентрация примеси и температура в двухфазной зоне, а коэффициенты переноса определяются, например, следующим образом [65, 66]:

$$D(\varphi) = D_c (1 - \varphi), \quad \rho(\varphi) c(\varphi) = \rho_1 c_1 (1 - \varphi) + \rho_s c_s \varphi,$$

$$\lambda_{sl}(\varphi) = \lambda_1 (1 - \varphi) + \lambda_s \varphi.$$

Здесь  $\rho_l$  и  $\rho_s$  — плотности жидкой и твердой фаз,  $c_l$  и  $c_s$  — их теплоемкости, а  $\lambda_l$  и  $\lambda_s$  — их теплопроводности. Использование этих конкретных выражений не принципиально с точки зрения развития настоящей теории.

Концентрационное переохлаждение  $\Delta\theta$ , частично компенсируемое вследствие роста твердой фазы, определяется разностью между температурой фазового перехода и локальной температурой в двухфазной области:

$$\Delta\theta = \theta_m + f_0(\sigma) - \theta, \quad (13)$$

где  $f_0(\sigma) = m_c\sigma$  в случае линейного уравнения ликвидуса. Границы двухфазной области  $z = 0$  и  $z = -\delta$  определяются обращением выражения (13) в ноль.

Подчеркнем важную особенность диффузионного уравнения (11). Если двухфазная зона рассматривается как область нуклеирующих и растущих частиц твердого материала, окруженных дендритоподобными структурами, то в самом простом случае долю твердой фазы  $\phi$  можно представить как сумму долей твердых фаз, вызванных ростом частиц твердого материала ( $\phi_{sp}$ ) и дендритных структур ( $\phi_{ds}$ ), т.е. написать  $\phi = \phi_{sp} + \phi_{ds}$ .

Рассмотрим такую область двухфазного региона, где жидкость преимущественно движется вдоль оси кристаллизации  $z$ . В этой области преобладающим будет конвективное слагаемое, пропорциональное изменению концентрации по оси  $z$ , а два других конвективных члена могут считаться малыми. Учитывая также, что при развитом конвективном режиме диффузионный терм является малым, воспользуемся конвективным уравнением Шейла [67], следующим из (11) при сделанных предположениях. Интегрирование этого уравнения с граничным условием  $\sigma(0) = \sigma_\infty$  дает

$$\sigma(\phi) = \sigma_\infty (1 - \phi)^{s_0}, \quad s_0 = k - 1, \quad (14)$$

где  $\sigma_\infty$  — концентрация примеси в расплаве на границе с двухфазной зоной,  $u_z - z$  — компонента скорости жидкости  $\vec{u}$ . Дальнейшее решение задачи зависит от детализации математической модели процесса. Ниже рассмотрим две физически различные модели затвердевания с квазиравновесной и слаборавновесной областями фазового перехода.

#### КВАЗИРАВНОВЕСНАЯ ОБЛАСТЬ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА С КОНВЕКЦИЕЙ

Этот сценарий затвердевания возникает в области неустойчивости (рис. 1 и 2) при выполнении условия концентрационного переохлаждения. Поскольку такая ситуация как раз и возникает при анализе кривой нейтральной устойчивости (10) (области под кривыми на рис. 1 и 2), рассмотрение этого режима оправдано с точки зрения его практической реализации. Эта модель процесса описывает развивающиеся в глубину переохлажденной жидкости ростовые формы неустойчивости фронта затвердевания. Если процесс роста таких дендритоподобных образований происходит достаточно интенсивно, то выделяемая ими скрытая теплота кристаллизации будет полностью снимать концентрационное переохлаждение области фазового перехода. В этом случае  $\Delta\theta$  в (13) равно нулю, а двухфазная зона называется квазиравновесной. Примем в рассматриваемой модели, что  $\phi = \phi_{ds}$ . Расширим теоретический подход, развитый для безконвективной кристаллизации в работах [48–52], на случай затвердевания при наличии конвекции.

Подставляя явные зависимости  $\sigma(\phi)$  и  $\theta(\sigma(\phi))$ , следующие из выражений (13) и (14) для квазиравновесной двухфазной области в уравнение теплопроводности (12), получаем явное выражение для обратной функции  $z(\phi)$ :

$$z(\phi_{ds}) = s_0 \sigma_\infty \int_0^{\phi_{ds}} \frac{\lambda_{sl}(\phi_1)(1 - \phi_1)^{s_0-1}}{L_T(u_z - V)\phi_1 + I_0(\phi_1) - \lambda_l G_1 d\sigma} \frac{df_0(\phi_1)}{d\phi_1} d\phi_1. \quad (15)$$

Здесь учтены граничные условия

$$\varphi_{ds} = 0, \quad \frac{d\varphi_{ds}}{dz} = \frac{G_1}{(1-k)\sigma_\infty} \left( \frac{df_0}{d\sigma} \right)^{-1}_{\varphi_{ds}=0}, \quad z = 0,$$

а также введены следующие обозначения:

$$I_0(\varphi_1) = s_0 \sigma_\infty \int_0^{\varphi_1} S(\varphi_2) (1-\varphi_2)^{s_0-1} \frac{df_0}{d\sigma}(\varphi_2) d\varphi_2,$$

$$S(\varphi_2) = \rho(\varphi_2) c(\varphi_2) (u_z - V).$$

На границе твердая фаза – двухфазная зона имеем граничное условие баланса тепла

$$\lambda_s G_s - (1 - \varphi_*) V L_V = [\lambda_1 (1 - \varphi_*) + \lambda_s \varphi_*] \frac{df_0}{d\sigma} \frac{d\sigma}{dz}, \quad z = -\delta, \quad \varphi_{ds} = \varphi_*, \quad (16)$$

где за  $\varphi_*$  обозначено граничное значение доли твердой фазы  $\varphi_{ds}$ . Теперь выражения (15) и (16) позволяют определить  $\varphi_*$  и  $\delta$  при учете зависимости  $\delta = -z(\varphi_*)$ .

#### СЛАБОНЕРАВНОВЕСНАЯ ОБЛАСТЬ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА С КОНВЕКЦИЕЙ

Рассмотрим теперь другой предельный сценарий кристаллизации, когда  $\varphi = \varphi_{sp}$ . Для анализа задачи применим подобную теорию затвердевания развитую ранее для безконвективной кристаллизации в работах [59–61]. Как известно, в таком режиме частота зародышеобразования, доля твердой фазы и переохлаждение оказываются зависимыми друг от друга через функцию распределения кристаллов, образующихся на частицах примеси в двухфазной зоне. Для описания зависимости частоты нуклеации  $I$  от переохлаждения будем использовать полуэмпирическую теорию Френкеля–Зельдовича [68, 69]:

$$I = I_* \exp\left(-\frac{p}{(\Delta\theta)^2}\right), \quad (17)$$

где  $I_*$  – предэкспоненциальный фактор, а  $p$  – размерное число Гиббса.

Для представления зависимости скорости роста частиц  $dr/dt$  твердой фазы (которые предполагаются сферической формы) будем использовать теорию, развитую в работах [3, 17]. В соответствии со сказанным имеем

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\beta_* \Delta\theta}{1 + \beta_* L_V r / \lambda_1}, \quad (18)$$

где  $\beta_*$  – кинетический коэффициент, а  $r$  – радиус сферических кристаллов.

Эволюция ядер новой фазы описывается кинетическим уравнением для плотности функции распределения  $f$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{dr}{dt} f \right) = 0, \quad (19)$$

которое решается со следующим граничным условием [3]:

$$\left( \frac{dr}{dt} f \right)_{r=0} = I_* \exp\left(-\frac{p}{(\Delta\theta)^2}\right). \quad (20)$$

Доля твердой фазы  $\varphi_{sp}$  выражается интегралом по всем размерам от функции распределения

$$\varphi_{sp}(z, t) = \frac{4\pi}{3} \int_0^{\infty} r^3 f(r, z, t) dr. \quad (21)$$

Отметим, что в соответствии с модельными предположениями частицы, имеющие радиус меньше некоторого критического значения (которое в теории принимается нулевым), являются не способными к росту и растворяются. Также подчеркнем, что зависимости (17)–(21) не учитывают взаимодействия частиц при их росте. Другими словами, механизмы агломерации, коалесценции и оствальдова созревания в настоящей модели не рассматриваются. Несмотря на такое, кажущееся на первый взгляд существенное упрощение, нахождение функции распределения  $f$  из соотношений (19) и (20) сопряжено с неизвестной зависимостью  $\Delta\theta$ , которая в соответствии с выражениями (11)–(13) зависит от  $\varphi_{sp}$ , а доля твердой фазы, в свою очередь, зависит от  $f$  посредством интеграла (21). Таким образом, поставленная задача оказывается “сцепленной”, что и составляет главную трудность в ее решении. В работах [59–61] был разработан метод решения такой задачи в отсутствие конвекции, который связан с “расцеплением” вышеупомянутых уравнений нелинейной интегро-дифференциальной системы. Ниже адаптируем эту теорию на конвективную кристаллизацию.

В движущейся с постоянной скоростью  $V$  системе отсчета уравнения (18)–(20) примут вид

$$\frac{\beta_* \Delta\theta}{V - u_z} + (1 + qr) \frac{dr}{dz} = 0, \quad \frac{\beta_* \Delta\theta}{V - u_z} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{f}{1 + qr} \right) = \frac{\partial f}{\partial z}, \quad q = \frac{\beta_* L_V}{\lambda_1}, \quad (22)$$

$$(f)_{r=0} = \frac{I_*}{\beta_* \Delta\theta} \exp\left(-\frac{p}{(\Delta\theta)^2}\right), \quad (f)_{z=0} = 0. \quad (23)$$

В этой системе отсчета функция распределения не зависит явным образом от времени. Из уравнения (22) с граничными условиями (23) можно в явном виде найти функциональную зависимость  $f$  от переохлаждения и других параметров системы [3]. Это решение определяется соотношениями

$$f(r, z) = (1 + qr) \eta(x(z) - y(r)) H(x(z) - y(r)), \quad (24)$$

$$x(z) = \frac{\beta_*}{V - u_z} \int_0^z \Delta\theta(s) ds, \quad y(r) = \left(1 + \frac{qr}{2}\right) r, \quad \eta(\mu) = \frac{I_*}{\beta_* \Delta\theta(\mu)} \exp\left(-\frac{p}{(\Delta\theta(\mu))^2}\right).$$

Здесь  $H(\mu)$  представляет собой функцию Хевисайда. Интегрирование первого уравнения (22) с пограничными условиями  $r = 0$  при  $z = \zeta$  определяет выражение для  $r$  (более детально это изложено в работах [59–61])

$$r = q^{-1} \left[ \sqrt{1 + 2q(x(z) - x(\zeta))} - 1 \right]. \quad (25)$$

Выражение (25) определяет радиусы частиц  $r(z)$ , возникающих в точке  $z = \zeta$  области фазового превращения.

Вместо переменной  $r$  введем новую переменную  $\zeta$  следующим образом:

$$x(\zeta) = x(z) - y(r).$$



Теперь учитывая, что  $\beta_* \Delta\theta(\zeta) d\zeta = (V - u_z)(1 + qr) dr$  из выражений (21), (24) и (25), будем иметь

$$\varphi_{sp}(z) = \frac{4\pi I_*}{3(V - u_z)} \int_z^0 w(z, \zeta) \exp(pS(\zeta)) d\zeta, \quad (26)$$

$$w(z, \zeta) = q^{-3} \left[ \sqrt{1 + 2q(x(z) - x(\zeta))} - 1 \right]^3,$$

$$S(\zeta) = -(\Delta\theta)^{-2}.$$

Интеграл (26), подынтегральная функция которого зависит от переохлаждения, можно приближенно вычислить с помощью метода Лапласа расчета интегралов от экспоненциальных функций (см., например, [70, 71]) при условии, что  $pS(\zeta) \gg 1$ . Поскольку последнее обычно выполняется [17], получим

$$\varphi_{sp}(z) = a(v)w(z, v), \quad a(v) = \frac{4\pi I_*}{3(V - u_z)} \sqrt{-\frac{\pi(\Delta\theta(v))^3}{p\Delta\theta''(v)}} \exp\left(-\frac{p}{(\Delta\theta(v))^2}\right). \quad (27)$$

Здесь  $v$  ( $-\delta < v < 0$ ) представляет собой точку максимального переохлаждения в зоне фазового перехода. При этом в точке  $v$ , как показывают выражения (26) и (27), доля твердой фазы  $\varphi$  обращается в ноль. Это означает, что во всем регионе  $v < z < 0$  доля твердой фазы отсутствует. Такое поведение  $\varphi_{sp}$  аналогично безконвективной теории работ [59–61].

Исключая температуру и концентрацию из выражений (12)–(14), получаем дифференциальное уравнение, определяющее переохлаждение в двухфазной зоне:

$$\frac{d^2\Delta\theta}{dz^2} + b_1(z)\frac{d\Delta\theta}{dz} + b_2(z) = 0, \quad (28)$$

$$b_1(z) = \frac{1}{\lambda_{sl}} \left[ \frac{d\lambda_{sl}}{d\varphi_{sp}} \frac{d\varphi_{sp}}{dz} + \rho c(u_z - V) \right],$$

$$b_2(z) = \frac{L_V(V - u_z)}{\lambda_{sl}} \frac{d\varphi_{sp}}{dz} - \frac{df_0}{d\sigma} \frac{d^2\sigma}{dz^2} - \left[ b_1 \frac{df_0}{d\sigma} + \frac{d^2f_0}{d\sigma^2} \frac{d\sigma}{dz} \right] \frac{d\sigma}{dz}.$$

Это уравнение решается при граничных условиях:  $\Delta\theta = 0$  в точках  $z = 0$  и  $z = -\delta$ . Отметим, что при записи уравнения (28) считается, что  $\varphi_{sp}(z)$  является известной функцией. Уравнение (28) представляет собой обобщение аналогичного уравнения для переохлаждения, найденного в безконвективном случае в работах [59–61] при частичном учете слагаемых в уравнении теплопроводности (12). Принимая теперь во внимание, что  $\varphi_{sp}(z) \approx 0$  в области  $v < z < 0$ , определяем переохлаждение в этом регионе:

$$\Delta\theta(z) = z_0 G_1 \left[ \exp\left(-\frac{z}{z_0}\right) - 1 \right], \quad z_0 = \frac{\lambda_1}{\rho_1 c_1 (V - u_z)}, \quad v < z < 0. \quad (29)$$

Выражения (27) и (29) определяют решение задачи в области  $v < z < 0$ , примыкающей к расплаву (регион II на рис. 3).

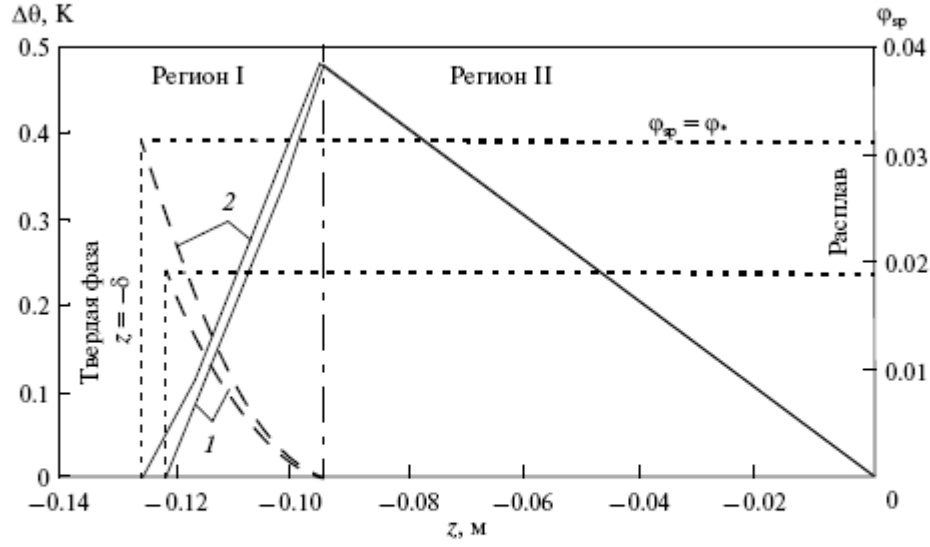


Рис. 3. Зависимость концентрационного переохлаждения (сплошные линии) и доли твердой фазы (штриховые) от пространственной координаты в области фазового перехода для сплава Fe–Ni при скоростях жидкости  $u_z$ , м/с:  $-8 \cdot 10^{-5}$  (1) и  $-12 \cdot 10^{-5}$  (2). Регионы I и II разделены вертикальной линией, обозначающей точку максимального переохлаждения. Физические параметры системы приведены в таблице; а также  $V = 10^{-6}$  м/с,  $\sigma_\infty = 7$  мас. %,  $G_s = 180$  К/м,  $\beta_* = 10^{-2}$  м/(с · К),  $p = 10^2$  К<sup>2</sup>,  $I_* = 10^{20}$ .

Далее, полагая в (28)  $d\Delta\theta/dz = 0$  и учитывая выражения (26) и (29), выполняющиеся в окрестности точки  $z = v$  максимума переохлаждения, получаем уравнение, определяющее эту точку:

$$G_1 \exp(-v/z_0) + z_0 b_2(v) = 0. \quad (30)$$

Теперь, зная  $v$  из уравнения (30), можно определить долю твердой фазы и переохлаждение в области, примыкающей к твердой фазе (регион I на рис. 3). В области  $-\delta < z < v$  точка максимума интеграла (26) лежит на границе самой области. Поэтому, применяя заново метод Лапласа, получаем

$$\varphi_{\text{сп}}(z) = b(v) w(z, v), \quad -\delta < z < v, \quad (31)$$

$$b(v) = \frac{4\pi I_*}{3(V - u_z)M} \exp\left(-\frac{p}{(\Delta\theta(v))^2}\right),$$

$$M = -\frac{2p}{(\Delta\theta(v))^3} \left( \frac{d\Delta\theta}{dz} \right)_{z=v}.$$

В этих соотношениях  $\Delta\theta(v)$  и ее производная определяются выражением (29). Учитывая теперь граничные условия  $\Delta\theta(v) = \Delta\theta(-\delta) = 0$ , находим общий интеграл уравнения (28):

$$\Delta\theta(z) = \Delta\theta(v) + \int_v^z F(\psi) d\psi, \quad -\delta < z < v, \quad (32)$$

$$F(\psi) = (I_2 - I_1(\psi)) E(\psi),$$

$$I_1(\psi) = \int_v^\psi b_2(\psi_1) \exp \left[ \int_v^{\psi_1} b_1(\psi_2) d\psi_2 \right] d\psi_1,$$

$$I_2 = - \frac{\Delta\theta(v) - \int_v^{-\delta} I_1(\psi) E(\psi) d\psi}{\int_v^{-\delta} E(\psi) d\psi}, \quad E(\psi) = \exp \left[ - \int_v^\psi b_1(\psi_1) d\psi_1 \right].$$

Таким образом, выражения (31) и (32) определяют решение задачи в области  $-\delta < z < v$ , прилегающей к твердой фазе (регион I на рис. 3). Для определения протяженности  $\delta$  области фазового перехода воспользуемся граничным условием баланса тепла, которое, в отличие от аналогичного условия (16) для квазиравновесной модели, зависит от переохлаждения. Опуская математические преобразования, получаем

$$\lambda_s G_s - (1 - \varphi_*) V L_V = [\lambda_1 (1 - \varphi_*) + \lambda_s \varphi_*] \left( \frac{df_0}{d\sigma} \frac{d\sigma}{dz} - \frac{d\Delta\theta}{dz} \right),$$

$$z = -\delta, \quad \varphi_{sp} = \varphi_*.$$

Рис. 3 показывает распределения переохлаждения и доли твердой фазы в области фазового превращения. Если двигаться от границы с расплавом, то переохлаждение ведет себя почти как линейная функция до точки максимума при различных значениях скорости течения жидкости. В окрестности этой точки происходит интенсивный рост частиц твердой фазы, который частично снимает переохлаждение. Дальнейшее поведение переохлаждения различно при изменении скорости жидкости. Ее уменьшение (возрастание по абсолютной величине) ведет к увеличению протяженности региона I вследствие возрастания концентрации примеси у границы с твердой фазой, что за собой влечет увеличение переохлаждения и значений доли твердой фазы. Поскольку нуклеация и последующий рост твердой фазы подавляющим образом происходят в регионе I, то его протяженность можно принять за толщину области фазового перехода.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Настоящая работа посвящена изучению условий возникновения протяженной области фазового перехода вследствие конвективной морфологической неустойчивости плоской границы раздела твердой и жидкой фаз. Линейный анализ устойчивости показывает, что конвекция играет определяющую роль на возникновение неустойчивого режима затвердевания, а также на сохранение условий устойчивой кристаллизации. Главным параметром, определяющим это влияние является скорость растяжения на границе с твердой фазой, а физической причиной — растягивающее течение жидкости. При этом существует критическое значение скорости растяжения, выше которого режим затвердевания всегда устойчив, а граница раздела фаз сохраняет плоскую форму. Значения скорости растяжения меньшие критического приводят к образованию неустойчивых форм роста фронта вследствие влияния концентрационного переохлаждения.

Расчеты, проведенные для двух сплавов показывают, что концентрационное переохлаждение существует как в области неустойчивости, так и в области устойчивости. В области неустойчивости оно способствует благоприятному прорастанию дендритоподобных структур в глубь переохлажденной жидкости и их дальнейшей эволюции с образованием двухфазной зоны, которая заполнена такими ростовыми элементами. В области конвективной устойчивости переохлаждение не приводит к возникновению морфологической неустойчивости плоской границы раздела твердой и жидкой фаз вследствие

стабилизирующего действия натекающей на твердую фазу жидкости. Единственной возможностью для образования области фазового перехода, реализующейся при существенных переохлаждениях, в этом случае является зарождение и последующий рост кристаллитов на примесных включениях переохлажденного расплава. В таком случае перед фронтом затвердевания появляется слабонервновесная область фазового перехода, заполненная зародышами твердой фазы.

Принципиально при конвективной кристаллизации возможна совместная эволюция дендритов и зародышей в двухфазной зоне. Математическая постановка такой сильно нелинейной интегро-дифференциальной задачи сформулирована в настоящей работе. Ее решение, сопряженное с рядом математических трудностей, представляет значительный интерес для последующих исследований. В настоящей работе рассмотрены ее предельные режимы чисто квазиравновесной и слабонервновесной теорий двухфазных зон при наличии конвекции. Найденные аналитические решения нелинейных интегро-дифференциальных уравнений демонстрируют значительное влияние скорости конвективного течения жидкости на основные характеристики процесса кристаллизации.

Работа частично выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 11-01-00137) и ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009–2013 гг.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Флемингс М. Процессы затвердевания. – М.: Мир, 1977. – 423 с.
2. Оно А. Затвердевание металлов. – М.: Металлургия, 1980. – 152 с.
3. Buyevich Yu. A., Alexandrov D. V., Mansurov V. V. Macrokinetics of crystallization. – New-York – Wallingford: Begell House, 2001. – 183 p.
4. Mullins W. W., Sekerka R. F. Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy. – J. Appl. Phys., 1964, 35, p. 444–451.
5. Sekerka R. F. A stability function for explicit evaluation of the Mullins-Sekerka interface stability criterion. – J. Appl. Phys., 1965, 36, p. 264–268.
6. Sekerka R. F. Morphological stability. – J. Crystal Growth, 1968, 3–4, p. 71–81.
7. Чалмерс Б. Теория затвердевания. – М.: Металлургия, 1968. – 288 с.
8. Ландау Л. Д. К теории медленного горения. – ЖЭТФ, 1944, 14, с. 240–249.
9. Воронков В. В. Условия образования ячеистой структуры фронта кристаллизации. – ФТТ, 1964, 6, с. 2984–2988.
10. Бувич Ю. А. Неустойчивость автомодельного фронта фазового перехода. – ИФЗ, 1981, 40, с. 818–827.
11. Бувич Ю. А., Исакова Л. Ю., Мансуров В. В. Нелинейная устойчивость и формирование структур при направленном затвердевании бинарного расплава. Часть I. – Расплавы, 1989, 6, с. 44–50.
12. Бувич Ю. А., Исакова Л. Ю., Мансуров В. В. Нелинейная устойчивость и формирование структур при направленном затвердевании бинарного расплава. Часть II. – Расплавы, 1990, 2, с. 65–73.
13. Delves R. T. The theory of stability during temperature gradient zone melt. – Phys. Stat. Sol., 1967, 20, p. 693–704.
14. Бычков Ю. А., Иорданский С. В. Неустойчивость границы раздела фаз в процессе фазового превращения. – ПМТФ, 1980, 5, с. 45–51.
15. Бадратинова Л. Г. Об устойчивости плоского фронта кристаллизации, движущегося с постоянной скоростью. – ПМТФ, 1983, 3, с. 113–120.
16. Лодиз Р., Паркер Р. Рост монокристаллов. – М.: Мир, 1974. – 544 с.
17. Чернов А. А., Гиваргизов Е. И., Багдасаров Х. С. Современная кристаллография. Т. 3. Образование кристаллов. – М.: Наука, 1980. – 370 с.
18. Coriell S. R., Hurler D. T. J., Sekerka R. F. Interface stability during crystal growth: the effect of stirring. – J. Crystal Growth, 1976, 32, p. 1–7.
19. Coriell S. R., Cordes M. R., Boettinger W. J., Sekerka R. F. Convective and interfacial instabilities during unidirectional solidification of a binary alloy. – J. Crystal Growth, 1980, 49, p. 13–28.

20. Coriell S.R., Sekerka R.F. Effects of convective flow on morphological stability. — *Physicochem. Hydrodyn.*, 1981, 2, p. 281–293.
21. Favier J.J., Rouzaud A. Morphological stability of the solidification interface under convective conditions. — *J. Crystal Growth*, 1983, 64, 367–379.
22. Novick-Kohen A., Sivashinsky G.I. On the solidification front of a dilute binary alloy: thermal diffusivity effects and breathing solutions. — *Physica D.*, 1986, 20, p. 237–258.
23. Александров Д.В., Асеев Д.Л. Влияние термодиффузии на морфологическую устойчивость процесса автомодельного затвердевания с плоским фронтом. — *Расплавы*, 2005, 2, 50–62.
24. Wheeler A.A. The effect of a periodic growth rate on the morphological stability of a freezing binary alloy. — *J. Crystal Growth*, 1984, 67, p. 8–26.
25. Cserti J., Tichy G. Stability of anisotropic liquid-solid interfaces. — *Acta Metall.*, 1986, 34, p. 1029–1034.
26. Trivedi R., Mason J.T. The effects of interface attachment kinetics on solidification interface morphologies. — *Metall. Trans. A.*, 1991, 22A, p. 235–249.
27. Merchant G.J., Davis S.H. Morphological instability in rapid directional solidification. — *Acta Metall. Mater.*, 1990, 38, p. 2683–2693.
28. Aleksandrov D.V., Mansurov V.V., Galenko P.K. Morphological stability of the plane phase boundary in a binary melt for processes of high-rate crystallization. — *Doklady Physics*, 1996, 41, p. 511–513.
29. Alexandrov D.V. The effect of concentrational supercooling on the morphological stability of self-similar solidification with a planar front. — *Doklady Physics*, 2001, 46, p. 453–458.
30. Alexandrov D.V. Absolute morphological stability of the self-similar solidification with a planar front. — *J. Metast. Nanocryst. Mater.*, 2004, 20–21, p. 476–481.
31. Alexandrov D.V. Self-similar solidification: morphological stability of the regime. — *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2004, 47, p. 1383–1389.
32. Александров Д.В., Галенко П.К., Малыгин А.П., Херлах Д.М. Отбор устойчивого режима роста вершины параболического дендрита при вынужденном конвективном течении и кристаллизации бинарной жидкости. — *Вестн. Удмурт. ун-та*, 2010, 1, с. 3–16.
33. Alexandrov D.V., Galenko P.K., Herlach D.M. Selection criterion for the growing dendritic tip in a non-isothermal binary system under forced convective flow. — *J. Crystal Growth*, 2010, 312, p. 2122–2127.
34. Aleksandrov D.V., Mansurov V.V. Dynamical instability of quasi-steady solidification in a binary melt with a narrow pseudoequilibrium two-phase zone. — *Crystallography Reports*, 1996, 41, 357–359.
35. Aleksandrov D.V., Mansurov V.V. Dynamic stability of quasi-stationary solidification of a binary melt in the presence of a broad pseudoequilibrium two-phase zone. — *Crystallography Reports*, 1997, 42, 357–359.
36. Alexandrov D.V., Ivanov A.O. Dynamic stability analysis of the solidification of binary melts in the presence of a mushy region: changeover of instability. — *J. Crystal Growth*, 2000, 210, p. 797–810.
37. Alexandrov D.V. Linear analysis of dynamic instability of solidification with a quasiequilibrium mushy zone. — *Int. J. Fluid Mech. Research*, 2000, 27, p. 239–247.
38. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Convective instability of directional crystallization in a forced flow: The role of brine channels in a mushy layer on nonlinear dynamics of binary systems. — *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2011, 54, p. 1144–1149.
39. Александров Д.В., Малыгин А.П. Конвективная неустойчивость кристаллизации с зоной фазового перехода. — *ЖЭТФ*, 2011, 139, p. 688–694.
40. Hills R.N., Loper D.E., Roberts P.H. A thermodynamically consistent model of a mushy zone. — *Q. J. Mech. Appl. Math.*, 1983, 36, p. 505–539.
41. Борисов В.Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. — М.: Металлургия, 1987. — 224 с.
42. Иванцов Г.П. Диффузионное переохлаждение при кристаллизации бинарного сплава. — *ДАН СССР*, 1951, 81, № 2, с. 179–182.

43. Alexandrov D.V., Churbanov A.G., Vabishchevich P.N. Emergence of a mushy region in processes of binary melt solidification. — *Int. J. Fluid Mech. Research*, 1999, 26, p. 248–264.
44. Alexandrov D.V. Incipience of a mushy zone in binary melt solidification processes. — *Int. J. Fluid Mech. Research*, 2000, 27, p. 223–238.
45. Alexandrov D.V. On the theory of the formation of the two-phase concentration-supercooling region. — *Doklady Physics*, 2003, 48, p. 481–486.
46. Alexandrova I.V., Alexandrov D.V., Aseev D.L., Bulitcheva S.V. Mushy layer formation during solidification of binary alloys from a cooled wall: the role of boundary conditions. — *Acta Physica Polonica A*, 2009, 115, p. 791–794.
47. Worster M.G. Solidification of an alloy from a cooled boundary. — *J. Fluid Mech.*, 1986, 167, p. 481–501.
48. Alexandrov D.V. Solidification with a quasiequilibrium mushy zone: exact analytical solution. — *Int. J. Fluid Mech. Research*, 2000, 27, p. 213–222.
49. Alexandrov D.V. Theory of solidification with a quasi-equilibrium two-phase zone. — *Doklady Physics*, 2000, 45, p. 569–573.
50. Alexandrov D.V. Solidification with a quasiequilibrium mushy region: analytical solution of nonlinear model. — *J. Crystal Growth*, 2001, 222, p. 816–821.
51. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Analytical solution for a problem of directional solidification in a ternary system. — *Acta Physica Polonica A*, 2009, 115, p. 786–790.
52. Alexandrov D.V., Ivanov A.A. Nonlinear dynamics of directional solidification of ternary solutions with mushy layers. — *Heat Mass Transfer*, 2009, 45, p. 1467–1472.
53. Александров Д.В., Иванов А.А., Малыгин А.П. К теории нестационарного затвердевания при наличии двухфазной зоны. — *Расплавы*, 2008, 5, с. 69–76.
54. Александров Д.В., Иванов А.А., Малыгин А.П. Автомодельное затвердевание с двухфазной зоной от охлаждаемой стенки. — *Вестн. Удмурт. ун-та*, 2008, 1, с. 14–25.
55. Alexandrov D.V., Ivanov A.A., Malygin A.P. Self-similar solidification of binary alloys. — *Acta Physica Polonica A*, 2009, 115, p. 795–799.
56. Alexandrov D.V., Malygin A.P. Analytical description of seawater crystallization in ice fissures and their influence on heat exchange between the ocean and the atmosphere. — *Doklady Earth Sciences*, 2006, 411A, p. 1407–1411.
57. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G., Malygin A.P., Huang H.-N., Lee D. Unidirectional solidification of binary melts from a cooled boundary: analytical solutions of a nonlinear diffusion-limited problem. — *J. Phys.: Cond. Matt.*, 2008, 20, p. 114105-01-06.
58. Alexandrov D.V., Nizovtseva I.G., Lee D., Huang H.-N. Solidification from a cooled boundary with a mushy layer under conditions of nonturbulent and turbulent heat and mass transfer in the ocean. — *Int. J. Fluid Mech. Research*, 2010, 37, p. 1–14.
59. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Nonlinear dynamics for the solidification of binary melt with a nonequilibrium two-phase zone. — *Doklady Physics*, 2006, 51 p. 291–295.
60. Aseev D.L., Alexandrov D.V. Directional solidification of binary melts with a nonequilibrium mushy layer. — *International J. Heat and Mass Transfer*, 2006, 49, p. 4903–4909.
61. Александров Д.В., Асеев Д.Л., Малыгин А.П. К теории процессов затвердевания с неравновесной двухфазной зоной. — *Расплавы*, 2011, 1, с. 16–30.
62. Deguen R., Alboussiere T., Brito D. On the existence and structure of a mush at the inner core boundary of the Earth. — *Phys. Earth Planet. Inter.*, 2007, 164, p. 36–49.
63. Александров Д.В., Нетребя А.В., Малыгин А.П. К теории направленной кристаллизации с зоной фазового перехода при наличии конвекции и кинетики в расплаве. — *Расплавы*, 2011, 4, с. 62–76.
64. Loper D.E. A model of the dynamical structure of Earth's outer core. — *Phys. Earth Planet. Inter.*, 2000, 117, p. 179–196.
65. Batchelor G.K. Transport properties of two-phase materials with random structure. — *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 1974, 6, p. 227–255.
66. Buyevich Yu.A., Alexandrov D.V. Heat transfer in dispersions. — New-York: Begell House, 2005. — 275 p.
67. Scheil E. Bemerkungen zur schichtkristallbildung. — *Zeichrft fur Metallkunde*, 1942, 34, S. 70–72.

- 
68. Z e l d o v i c h Ya. B. On the theory of formation of a new phase. Cavitation.— J. Eksperiment. Technich. Fiz., 1942, 12, p. 525–536.
69. F r e n k e l J. Theory of liquids. — New-York: Dover, 1955.
70. N a y f e n A. H. Introduction to perturbation techniques. — New-York, Chichester, Brisbane, Toronto: Wiley Interscience Publication, 1981.
71. Ф е д о р ю к М. В. Асимптотика, интегралы и ряды. — М.: Наука, 1987.

Уральский федеральный университет  
им. первого Президента России Б.Н. Ельцина  
Екатеринбург

Поступила в редакцию  
27 апреля 2011 г

## Analytical Description of the Quasi-Stationary Solidification of Ternary Systems

A. P. Malygin and D. V. Alexandrov

Ural State University, pr. Lenina 51, Yekaterinburg, 620083 Russia

e-mail: Alexey.Malygin@usu.ru

Received May 24, 2011

**Abstract**—The directional solidification of ternary systems at a constant rate is studied. The following analytical solutions to the problem are found: the temperature and concentration distributions and the fractions of the solid phases of solidifying components in the parent and cotectic mushy zones, which represent a phase transition region. The solidification rate and the mushy zone lengths are determined.

DOI: 10.1134/S0036029512020139

### INTRODUCTION

The presence of an impurity is known to radically change the solidification characteristics of melts and solutions [1–3]. Concentration supercooling, which was first detected in [4], is one of the most important effects that appear during solidification (the mechanism of appearance of this type of supercooling and its specific features were comprehensively described in book [5] in comparison with thermal supercooling). The numerical simulation of solidification from a cooled wall performed in [6, 7] and the approximate theory of this process developed in [8, 9] show that concentration supercooling appears rather fast (within several minutes) after the beginning of solidification. After a supercooled region forms in front of a solid–melt phase transition boundary, solidification cannot be described in terms of the classical thermodiffusion Stefan problem with a plane front [10]. The reaction of the system to the formation of concentration supercooling is the formation of conditions for the predominant growth of solid phase projections into a supercooled melt. In other words, a plane phase transition front boundary becomes morphologically unstable.

A linear analysis of this instability for the solidification of a plane front at a constant rate was performed for the first time in classical works [11–13], and the authors of [14] generalized this problem to the case of locally nonequilibrium solidification. This analysis showed the presence of a parameter range during solidification in which instability can result in complex impurity distribution structures. To calculate the parameters of such structures, the authors of [15] developed a nonlinear theory of the stability of a plane interface (in [16], this theory was applied for a nonlinear analysis of the stability of a break surface simulating the phase transition region). The growth structures

of the solid phase in the phase transition region, the space between which is filled with a supercooled liquid, form a two-phase region (mushy layer) located between purely solid and liquid phases in the system. Solidification in the presence of this mushy layer becomes much more complex than the frontal solidification process. For example, both the growth of dendrite structures [17, 18] and homogeneous nucleation of solid-phase particles on dissolved impurities [19–21] can occur in the phase transition region. The conditions of the region formation before a plane front were theoretically studied for nonstationary solidification under self-similar conditions [22–29]. It should be noted that the instability can change its type (from a soft into a hard type) when the thermophysical parameters change [30].

The mathematical model of the solidification of binary compounds with a mushy layer was first generalized in [31, 32]. This model represents a nonlinear nonstationary set of equations in a mushy layer and solid and liquid phases that are related by boundary conditions at the moving solid phase–mushy layer and mushy layer–liquid phase interfaces. There are no general methods for solving such complex problems with moving boundaries, and the further development of the theory was associated with the development of approximate methods for solving this problem. A significant simplification can be achieved in considering the intense solid phase growth in the mushy layer when the releasing latent heat of solidification compensates for the concentration supercooling.

For the case of solidification of binary systems, we [33–38] developed methods to obtain exact analytical solutions to nonlinear heat-and-mass transfer equations for solidification at a constant rate, which are based on passing to a new independent variable,



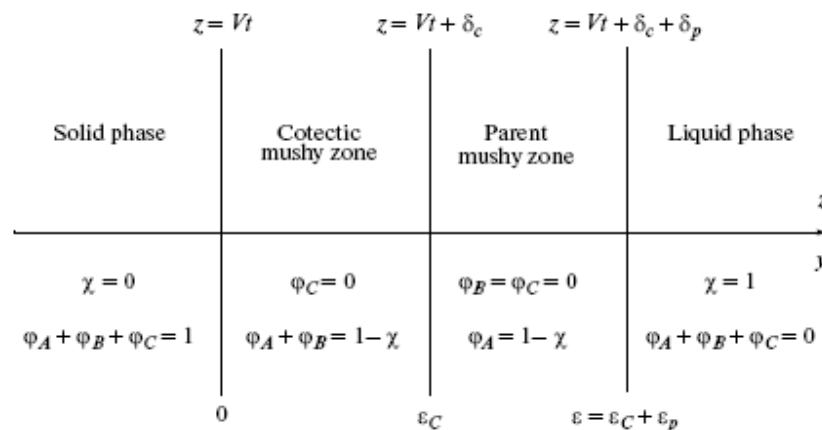


Fig. 1. Schematic diagram for the directional solidification of a ternary system with two phase transition zones.

namely, the fraction of a solid phase in the phase transition region (in those works, the theory was also generalized to the case of weak convection, thermomodification effects, and the temperature dependence of the diffusion coefficient). In [27–29], we developed methods for solving mushy layer equations for the solidification of binary melts under self-similar conditions, which are based on the expansion of temperature, the impurity concentration, and the fraction of a solid phase in power series. This theory was generalized in [39–44] to the case of solving mushy layer equations under strongly nonstationary solidification conditions (here, we used the Scheil equations [45, 46] and some additional estimations of the system parameters).

It is often necessary to take into account the presence of a third component in a system. Basic convective-free solidification equations in such a system were developed in [48] using the experimental data from [47]. Because of a strong nonlinearity of the system, Anderson [48] obtained its analytical solutions only for the case of absent diffusion at a zero latent heat of solidification. Later, we [49, 50] developed an approximate theory to solve the nonlinear equations in [48] under self-similar conditions without diffusion and for linear liquidus and cotectic equations. The authors of [51–53] developed methods to take into account diffusion [51, 52] and the deviations of these equations from linear relationships [53]. On the whole, the theory in [49–53] well describes the experimental data under self-similar solidification conditions. In this work, we propose a method to solve the mathematical model in [48], which describes the solidification of ternary systems under stationary conditions, when the solidification rate, the temperature distribution, the impurity concentration, and the fraction of a solid

phase in the system become steady and cease to depend on time.

#### MODEL FOR THE DIRECTIONAL SOLIDIFICATION OF A TERNARY SYSTEM

We analyze the directional solidification of a ternary system along spatial axis  $z$  (Fig. 1). Let  $A$  be the solvent concentration and  $B$  and  $C$  be the concentrations of two solutes,  $A + B + C = 1$ . Since the parent substance undergoes a phase transition in a region that does not coincide with the phase transition region of the second substance, two mushy zones, namely, parent and cotectic ones, appear during solidification. Their lengths are designated as  $\delta_p$  and  $\delta_c$ . Taking into account the fact that the phase diagram of this system was comprehensively discussed in [48, 49], we will not dwell on the liquidus, cotectic, and eutectic equations. It is important that the temperature field relaxation time  $\tau_T = l^2/\kappa$  is much shorter than the characteristic times of concentration field relaxation times  $\tau_B = l^2/D_B$  and  $\tau_C = l^2/D_C$ , i.e.,  $\tau_T \ll \tau_C$  and  $\tau_T \ll \tau_B$ , where  $l$  is the characteristic length scale,  $\kappa$  is the thermal diffusivity, and  $D_B$  and  $D_C$  are the diffusion coefficients of impurities  $B$  and  $C$ , respectively. As follows from this estimation of the relaxation times, the derivatives of temperature with respect to time  $t$  are much smaller than the other terms of the corresponding model equations. Allowing for this circumstance, we write a mathematical model for solidification using the results from [48].

In the liquid phase (melt) of the system, impurity concentrations  $B_\infty$  and  $C_\infty$  and temperature gradient  $G_L$  are specified quantities; that is,

$$B \rightarrow B_\infty, \quad C \rightarrow C_\infty, \quad z \rightarrow \infty, \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = G_L, \quad z > Vt + \delta = Vt + \delta_c + \delta_p, \quad (2)$$

where  $T$  is the temperature and  $V$  is the constant solidification rate. Moreover, the following impurity diffusion equations are satisfied in the liquid phase:

$$\frac{\partial B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 B}{\partial z^2}, \quad \frac{\partial C}{\partial t} = D_C \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, \quad z > Vt + \delta. \quad (3)$$

The boundary conditions at the parent mushy layer–melt interface, which have the physical meaning of the balance of heat, mass, and continuity conditions, are written as follows:

$$L_V V [\varphi_A]_-^+ = \left[ \bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right]_-^+, \quad (4)$$

$$[T]_-^+ = [B]_-^+ = [C]_-^+ = 0, \quad z = Vt + \delta,$$

$$BV [\varphi_A]_-^+ = D_B \left[ \chi \frac{\partial B}{\partial z} \right]_-^+, \quad (5)$$

$$CV [\varphi_A]_-^+ = D_C \left[ \chi \frac{\partial C}{\partial z} \right]_-^+, \quad z = Vt + \delta,$$

$$\left( \frac{\partial T}{\partial z} \right)^+ = m_B \left( \frac{\partial B}{\partial z} \right)^+ + m_C \left( \frac{\partial C}{\partial z} \right)^+, \quad z = Vt + \delta. \quad (6)$$

Here,  $L_V$  is the latent heat of solidification;  $\bar{k} = k_L \chi + k_S(1 - \chi)$ ;  $k_L$  and  $k_S$  are the heat-transfer coefficients of the melt and solid phase, respectively;  $\chi$  is the fraction of the liquid phase;  $m_B$  and  $m_C$  are the liquidus slopes of components  $B$  and  $C$ , respectively; and  $\varphi_A$  is the fraction of the solid phase of component  $A$ . Symbols  $[\cdot]_-^+$  and  $(\cdot)^+$  designate the jump of a quantity at the interface and its value on the right of the interface. Note that Eq. (6) has the meaning of the marginal equilibrium condition from [48].

In the parent mushy zone, where component  $A$  undergoes a phase transition ( $\chi = 1 - \varphi_A$ ), heat-and-mass transfer equations are written in the form

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \bar{k} \frac{dT}{dz} \right) + L_V \frac{\partial \varphi_A}{\partial t} = 0, \quad T \equiv T^L(B, C) = T_M + m_B B + m_C C, \quad (7)$$

$$Vt + \delta_c < z < Vt + \delta,$$

$$D_B \frac{\partial}{\partial z} \left( \chi \frac{\partial B}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} (\chi B) = 0, \quad D_C \frac{\partial}{\partial z} \left( \chi \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} (\chi C) = 0, \quad (8)$$

$$Vt + \delta_c < z < Vt + \delta,$$

where  $T_M$  is the phase-transition temperature of the pure substance.

We now write boundary conditions at the second interface between the cotectic and parent mushy zones. These conditions reflect the balance of heat and mass

and the continuity of the temperature field and the impurity concentration fields and are written as [48]

$$L_V V [\varphi_A + \varphi_B]_-^+ = \left[ \bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right]_-^+, \quad [T]_-^+ = [B]_-^+ = [C]_-^+ = 0, \quad (9)$$

$$m_B^C \left( \frac{\partial B}{\partial z} \right)^+ = m_C^C \left( \frac{\partial C}{\partial z} \right)^+, \quad z = Vt + \delta_c,$$

$$V \{ B [\varphi_A]_-^+ + (B - 1) [\varphi_B]_-^+ \} = D_B \left[ \chi \frac{\partial B}{\partial z} \right]_-^+, \quad (10)$$

$$VC [\varphi_A + \varphi_B]_-^+ = D_C \left[ \chi \frac{\partial C}{\partial z} \right]_-^+, \quad z = Vt + \delta_c.$$

Here,  $\varphi_B$  is the fraction of the solid phase of component  $B$  and  $m_B^C$  and  $m_C^C$  are the cotectic slopes of the liquidus of components  $B$  and  $C$ , respectively.

Heat-and-mass transfer equations in the cotectic mushy zone, where components  $A$  and  $B$  undergo phase transitions ( $\chi = 1 - \varphi_A - \varphi_B$ ) are written as

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right) + L_V \frac{\partial (\varphi_A + \varphi_B)}{\partial t} = 0, \quad Vt < z < Vt + \delta_c, \quad (11)$$

$$B \equiv B^C(T) = B_E - \frac{T - T_E}{m_B^C}, \quad (12)$$

$$C \equiv C^C(T) = -\frac{T - T_E^{AB}}{m_C^C}, \quad Vt < z < Vt + \delta_c,$$

$$D_B \frac{\partial}{\partial z} \left( \chi \frac{\partial B}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} (\chi B + \varphi_B) = 0, \quad (13)$$

$$D_C \frac{\partial}{\partial z} \left( \chi \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t} (\chi C) = 0, \quad Vt < z < Vt + \delta_c.$$

Here,  $T_E$ ,  $B_E$ , and  $C_E$  are the known temperature and impurity concentrations at the eutectic point of the ternary system, respectively, and  $T_E^{AB}$  is the temperature at the eutectic point of the corresponding binary system (see, e.g., [48, 49]).

The boundary conditions at the solid phase–cotectic zone interface have the form

$$L_V V [\varphi_A + \varphi_B + \varphi_C]_-^+ = \left[ \bar{k} \frac{\partial T}{\partial z} \right]_-^+, \quad (14)$$

$$T = T_E, \quad B = B_E, \quad C = C_E, \quad z = Vt,$$

$$V \{ B [\varphi_A]_-^+ + (B - 1) [\varphi_B]_-^+ + B [\varphi_C]_-^+ \} = D_B \left[ \chi \frac{\partial B}{\partial z} \right]_-^+, \quad z = Vt, \quad (15)$$

$$V \{ C [\varphi_A]_-^+ + C [\varphi_B]_-^+ + (C - 1) [\varphi_C]_-^+ \} = D_C \left[ \chi \frac{\partial C}{\partial z} \right]_-^+, \quad z = Vt. \quad (16)$$

In the solid phase, we have a constant temperature gradient  $G_S$ ; that is,

$$\partial T / \partial z = G_S, \quad z < Vt. \quad (17)$$

The set of Eqs. (1)–(17) represent a closed set of equations and boundary conditions for searching for the solution to the problem of the solidification of a ternary system at a constant rate.

#### EXACT ANALYTICAL SOLUTIONS FOR A NONLINEAR MODEL

We pass to a coordinate system moving at a constant velocity  $V$  and introduce the following dimensionless variables and parameters:

$$y = \frac{V(z - Vt)}{D_B}, \quad \varepsilon_p = \frac{V\delta_p}{D_B}, \quad \varepsilon_c = \frac{V\delta_c}{D_B}, \quad \varepsilon = \frac{V\delta}{D_B}, \quad (18)$$

$$D_{BC} = \frac{D_B}{D_C}, \quad \theta = \frac{T}{m_B B_\infty}, \quad m_{CB} = \frac{m_C}{m_B}, \quad m_{CB}^C = \frac{m_C^C}{m_B^C}.$$

In this new coordinate system, solidification is steady and all unknown functions are time-independent.

Diffusion equations (3) in variables (18) under boundary conditions (1) have the following integrals:

$$B(y) = B_\infty + B_1 \exp(-y), \quad (19)$$

$$C(y) = C_\infty + C_1 \exp(-D_{BC}y), \quad y > \varepsilon = \varepsilon_c + \varepsilon_p,$$

where  $B_1$  and  $C_1$  are constants of integration. We integrate heat-and-mass transfer equations (7) and (8) in the parent mushy zone and find the derivatives of temperature and impurity concentrations,

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{D_B(L_V V \varphi_A + A_1)}{m_B V B_\infty \bar{k}_p(\varphi_A)}, \quad (20)$$

$$\bar{k}_p(\varphi_A) = k_L(1 - \varphi_A) + k_S \varphi_A, \quad \varepsilon_c < y < \varepsilon,$$

$$\frac{dB}{dy} = \frac{A_2 - BV(1 - \varphi_A)}{V(1 - \varphi_A)}, \quad (21)$$

$$\frac{dC}{dy} = \frac{D_{BC}(A_3 - CV(1 - \varphi_A))}{V(1 - \varphi_A)}, \quad \varepsilon_c < y < \varepsilon,$$

where  $A_1 = \bar{k}_p(\varphi_{APL})G_{PL} - VL_V \varphi_{APL}$ ;  $A_2$  and  $A_3$  are constants of integration; and  $G_{PL}$  and  $\varphi_{APL}$  are the temperature gradient and the fraction of the solid phase at  $y = \varepsilon$ , respectively, determined on the side of the parent mushy zone. These unknowns will be found. We combine Eqs. (20) and (21) with liquidus equation (7) and find the relation between the  $B$  and  $C$  concentrations in the parent mushy zone,

$$B(\varphi_A) = g(\varphi_A) - D_{BC}m_{CB}C(\varphi_A), \quad \varepsilon_c < y < \varepsilon, \quad (22)$$

$$g(\varphi_A) = \frac{A_2}{V(1 - \varphi_A)} + \frac{D_{BC}m_{CB}A_3}{V(1 - \varphi_A)} - \frac{D_B(L_V V \varphi_A + A_1)}{m_B V \bar{k}_p(\varphi_A)}.$$

From Eqs. (21) and (22), we now determine the fraction of a solid phase in the parent mushy zone in the form of the inverse relationship

$$y(\varphi_A) = \varepsilon_c + \int_{\varphi_{ACP}}^{\varphi_A} S(\Phi_A) d\Phi_A, \quad \varepsilon_c < y < \varepsilon, \quad (23)$$

$$S(\Phi_A) = g'(\Phi_A)/g_1(\Phi_A),$$

$$g_1(\Phi_A)$$

$$= \frac{D_B}{m_B V \bar{k}_p(\Phi_A)} (L_V V (\Phi_A - \Phi_{APL}) + \bar{k}(\Phi_{APL}) G_{PL}).$$

Here,  $\varphi_{ACP}$  means the fraction of a solid phase on the right of the cotectic–parent mushy zone interface. Then, from Eq. (23) we determine the lengths of the parent mushy zone ( $\varepsilon_p$ ) and the entire phase transition region ( $\varepsilon$ ),

$$\varepsilon_p = \int_{\varphi_{ACP}}^{\varphi_{APL}} S(\Phi_A) d\Phi_A, \quad \varepsilon = \varepsilon_c + \int_{\varphi_{ACP}}^{\varphi_{APL}} S(\Phi_A) d\Phi_A. \quad (24)$$

For simplicity, we consider the case  $D_{BC} = 1$  [48]. When substituting Eq. (23) into Eq. (21), we find the impurity  $C$  concentration in the parent zone of the phase transition,

$$C(\varphi_A) = \left[ A_4 + A_3 \int_{\varphi_{ACP}}^{\varphi_A} \frac{S(\Phi_A) \exp(y(\Phi_A) - y(\varphi_A))}{V(1 - \Phi_A)} d\Phi_A \right], \quad (25)$$

$$\varepsilon_c < y < \varepsilon.$$

Equations (22)–(25) represent the parametric solution to the problem in the parent mushy zone, and the parameter is represented by the fraction of the solid phase  $\varphi_A$  (or  $\chi = 1 - \varphi_A$ ) of the component solidifying in this zone.

Substituting solutions (22)–(25) into boundary conditions (4)–(6), we obtain the following expressions, which determine the unknown constants:

$$\frac{G_L D_B \exp(\varepsilon)}{V m_B} + B_1 + m_{CB} C_1 = 0, \quad (26)$$

$$G_{PL} = \frac{k_L G_L + L_V V \varphi_{APL}}{\bar{k}_p(\varphi_{APL})}, \quad A_2 = V B_\infty, \quad A_3 = V C_\infty, \quad (27)$$

$$B_1 = [g(\varphi_{APL}) - B_\infty - m_{CB} C_\infty] \exp(\varepsilon) - m_{CB} C_1, \quad (28)$$

$$A_4 = [C_\infty + C_1 \exp(-\varepsilon)] \exp[\varepsilon - \varepsilon_c] - V C_\infty I_0,$$

$$I_0 = \int_{\varphi_{ACP}}^{\varphi_{APL}} \frac{S(\Phi_A) \exp[y(\Phi_A) - \varepsilon_c]}{V(1 - \Phi_A)} d\Phi_A. \quad (29)$$

Using Eqs. (26)–(28), we can express the fraction of the solid phase of component *A* on the left of the parent mushy zone–melt interface. Omitting the details of mathematical manipulations, we reduce this expression to the form

$$\varphi_{APL} \left[ \frac{m_B V (B_\infty + m_{CB} C_\infty)}{1 - \varphi_{APL}} - \frac{D_B [L_V V - G_L (k_S - k_L)]}{k_L + (k_S - k_L) \varphi_{APL}} \right] = 0. \quad (30)$$

The integration of Eqs. (11)–(13) in the cotectic region of the phase transition gives the following expressions:

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{D_B (L_V V (1 - \chi) + A_5)}{m_B V B_\infty \bar{k}_C(\chi)}, \quad (31)$$

$$\bar{k}_C(\chi) = k_L \chi + k_S (1 - \chi), \quad 0 < y < \varepsilon_C,$$

$$\frac{dB}{dy} = \frac{A_6 - V (\chi B + \varphi_B)}{V \chi}, \quad \frac{dC}{dy} = \frac{A_7 - V \chi C}{V \chi}, \quad (32)$$

$0 < y < \varepsilon_C.$

Here,  $A_5 = \bar{k}_C(\chi_{SC}^+) G_{SC} - L_V V (1 - \chi_{SC}^+)$ ;  $\chi = 1 - \varphi_A - \varphi_B$ ;  $A_6$  and  $A_7$  are constants of integration; and  $G_{SC}$  and  $\chi_{SC}^+$  are the temperature gradient and the fraction of the liquid phase, respectively, on the right of the solid material–cotectic zone interface. These constants will be determined below.

We combine Eqs. (12), (31), and (32) and obtain the distributions of the temperature, the impurity concentrations, and the fractions of the solid phases of both components in the cotectic zone,

$$\theta(\chi) = \frac{T_E^{AB} - m_C^C C(\chi)}{m_B B_\infty}, \quad (33)$$

$$C(\chi) = \frac{1}{V \chi} \left( A_7 + \frac{F_0(\chi)}{m_C^C} \right), \quad 0 < y < \varepsilon_C,$$

$$B(\chi) = m_{CB}^C C(\chi) + B_E + \frac{T_E - T_E^{AB}}{m_B^C}, \quad 0 < y < \varepsilon_C, \quad (34)$$

$$\varphi_A(\chi) = 1 - \chi - \varphi_B(\chi),$$

$$\varphi_B(\chi) = \frac{F_0(\chi)}{m_B^C V} + \frac{A_6}{V} - \chi B(\chi), \quad 0 < y < \varepsilon_C. \quad (35)$$

Here,  $m_{CB}^C$  is determined in Eq. (18) and

$$F_0(\chi) = \frac{D_B \bar{k}_C(\chi_{SC}^+) G_{SC} + L_V V (\chi_{SC}^+ - \chi)}{\bar{k}_C(\chi)}.$$

Allowing for

$$\frac{d\theta}{dy} = \frac{d\theta}{d\chi} \frac{d\chi}{dy},$$

we find the distribution of the fraction of the solid phase in the cotectic zone in the form of an inverse function and the dimensionless cotectic zone length,

$$y(\chi) = \frac{m_B V B_\infty}{D_B} \int_{\chi_{SC}^+}^{\chi} \frac{d\theta/d\chi_1}{F_0(\chi_1)} d\chi_1, \quad (36)$$

$$\varepsilon_C = \frac{m_B V B_\infty}{D_B} \int_{\chi_{SC}^+}^{\chi_{CP}} \frac{d\theta/d\chi_1}{F_0(\chi_1)} d\chi_1,$$

where  $\chi_{CP}$  is the fraction of the liquid phase on the left of the cotectic zone–parent mushy zone interface. Equations (33)–(36) represent the solutions to the problem in the cotectic zone of the phase transition. These solutions have a parametric form, as the solutions (22)–(25) in the parent mushy zone. However, the parameter here is the fraction of a liquid phase  $\chi$ .

We now substitute these solutions into boundary conditions (14)–(16), take into account temperature gradient (17), and obtain the following relationships for the unknown constants:

$$G_{SC} = \frac{k_S G_S - L_V V \chi_{SC}^+}{\bar{k}_C(\chi_{SC}^+)},$$

$$V(\varphi_{BSC}^- - \varphi_{BSC}^+ - B_E \chi_{SC}^+) + V(B_E \chi_{SC}^+ + \varphi_{BSC}^+) = A_6, \quad (37)$$

$$V(\varphi_{CSC}^- - \varphi_{CSC}^+ - C_E \chi_{SC}^+) + V C_E \chi_{SC}^+ = A_7,$$

$$A_7 = V C_E \chi_{SC}^+ - \frac{D_B \chi_{SC}^+}{m_C^C} G_{SC}, \quad (38)$$

where  $\varphi_{BSC}^-$  and  $\varphi_{BSC}^+$  are the fractions of the solid phase of component *B* on the left and right of the solid phase–cotectic zone interface and  $\varphi_{CSC}^-$  and  $\varphi_{CSC}^+$  are analogous values for component *C*.

The substitution of the temperature derivatives from Eqs. (20) and (31) into the first boundary condition of (9) determines the explicit dependence of the solidification rate on the temperature gradients in the solid and liquid phases,

$$V = \frac{k_S G_S - k_L G_L}{L_V}. \quad (39)$$

Note that Eq. (39) coincides with the solidification rate of the plane front and the mushy zone, which describe the solidification of binary mixtures.

We now substitute the derivatives of the impurity concentrations from Eqs. (21) and (32) into boundary conditions (10) and find the constants,

$$A_6 = V B_\infty, \quad A_7 = V C_\infty. \quad (40)$$

When combining Eqs. (37), (38), and (40), we obtain a quadratic equation to search for the fraction of the liquid phase on the right of the solid phase–cotectic zone interface. Its solution is

$$\chi_{SC}^+ = \frac{-a_1 \pm \sqrt{a_1^2 - 4a_2a_0}}{2a_2}, \quad (41)$$

$$a_0 = -Vk_S C_\infty, \quad a_1 = VC_E k_S - V(k_L - k_S)C_\infty - \frac{D_B k_S G_S}{m_C^C},$$

$$a_2 = \frac{D_B L_V V}{m_C^C} + VC_E(k_L - k_S).$$

Equation (41) has a single solution lying in a unit segment.

With boundary conditions (10), we can find the limiting values of impurity concentrations  $B_{CP}$  and  $C_{CP} = A_4$  at the interfacial surface between the cotectic and parent zones of the phase transition,

$$B_{CP} = m_{CB}^C C_{CP} + B_E + \frac{T_E - T_E^{AB}}{m_B^C} \quad (42)$$

$$= g(\varphi_{ACP}^+) - m_{CB}^C C_{CP},$$

$$C_{CP} = A_4 = \frac{1}{V\chi_{CP}^-}$$

$$\times \left( VC_\infty + \frac{D_B \chi_{CP}^- [\bar{k}_C(\chi_{SC}^+) G_S + L_V V (\chi_{SC}^+ - \chi_{CP}^-)]}{m_C^C \bar{k}_C(\chi_{CP}^-)} \right). \quad (43)$$

The substitution of  $B_{CP}$  from Eq. (42) into the second boundary condition of Eq. (9) determines an explicit relationship for the fraction of the solid phase on the right of the interface between the two-phase zones,

$$\varphi_{ACP}^+ = 1 - \frac{B_\infty - m_{CB}^C C_\infty}{B_*}, \quad B_* = B_E + \frac{T_E - T_E^{AB}}{m_B^C}. \quad (44)$$

Equation (44) shows that  $\varphi_{ACP}^+$  is only determined by the initial values of impurity concentrations  $B_\infty$  and  $C_\infty$  and the phase diagram of the ternary system.

With the derived equations, we can write the solution to Eq. (30) in the form

$$\varphi_{APL}^- = 0$$

or

$$\varphi_{APL}^- = \frac{H(G_S - G_L) - (B_\infty + m_{CB}^C C_\infty)k_L}{H(G_S - G_L) + (B_\infty + m_{CB}^C C_\infty)(k_S - k_L)},$$

$$H = \frac{D_B k_S}{m_B V}.$$

Since the second root does not belong to the unit segment, the first root ( $\varphi_{APL}^- = 0$ ) should be taken as the solution.

Then, combining Eqs. (42) and (43), we find the fraction of the liquid phase on the left of the interface between the cotectic and the parent two-phase zones,

$$\chi_{CP}^- = \frac{-b_1 \pm \sqrt{b_1^2 - 4b_2b_0}}{2b_2}, \quad b_0 = -\frac{m_C^C C_\infty}{D_B}, \quad (45)$$

$$b_1 = \frac{g(\varphi_{ACP}^+) - B_* m_C^C}{m_{CB}^C + m_{CB}} \frac{1}{D_B} - \frac{m_C^C (k_L/k_S - 1) C_\infty}{D_B} - \frac{G_S}{V},$$

$$b_2 = \frac{g(\varphi_{ACP}^+) - B_* m_C^C}{m_{CB}^C + m_{CB}} \frac{1}{D_B} + \frac{L_V}{k_S}.$$

Taking into account that Eq. (45) fully determines constant  $A_4$  from Eq. (43), we can use Eq. (29) to find constant  $C_1$ .

Using Eqs. (37) and (38), we determine the fractions of the solid phase of both components on the left of the solid phase–cotectic zone interface,

$$\varphi_{BSC}^- = B_\infty, \quad \varphi_{CSC}^- = C_\infty. \quad (46)$$

The boundary conditions on the right of this surface are found from distributions (35) as  $\varphi_{ASC}^+ = \varphi_A(\chi_{SC}^+)$  and  $\varphi_{BSC}^+ = \varphi_B(\chi_{SC}^+)$ . Moreover, distributions (35) also determine the boundary values of the fractions of the solid phase  $\varphi_{ACP}^-$  and  $\varphi_{BCP}^-$  of components  $A$  and  $B$  on the left of the interface between the cotectic and parent two-phase zones in the form  $\varphi_{ACP}^- = \varphi_A(\chi_{CP}^-)$  and  $\varphi_{BCP}^- = \varphi_B(\chi_{CP}^-)$ .

## CONCLUSIONS

Figure 2 shows the distributions of the fractions of solid and liquid phases over the entire phase transition region, which consists of cotectic and parent mushy zones. The fraction of solid substance  $\varphi_A$  of component  $A$ , which undergoes a phase transition in zones I and II, decreases monotonically in the phase transition region. However, the fraction of solid substance  $\varphi_B$  of component  $B$ , which undergoes a phase transition only in zone I, decreases only in the cotectic mushy zone. In this case, the length of cotectic zone I is smaller than that of parent region II of the phase transition. According to these dependences, the fraction of the liquid phase  $\chi$  increases monotonically over the entire phase transition region (zones I and II). In zone I, it is determined by the fractions of solid phases  $\varphi_A$  and  $\varphi_B$ ; in zone II, it is only determined by the fraction of  $\varphi_A$ . Therefore, the  $\chi(x)$  distribution also has an inflection point in the parent mushy zone, as the  $\varphi_A(x)$  function. Our calculations show that the fractions of solid and liquid phases at the interfaces between zones I, II and II, III are continuous (they are broken only at the solid phase–cotectic zone interface).

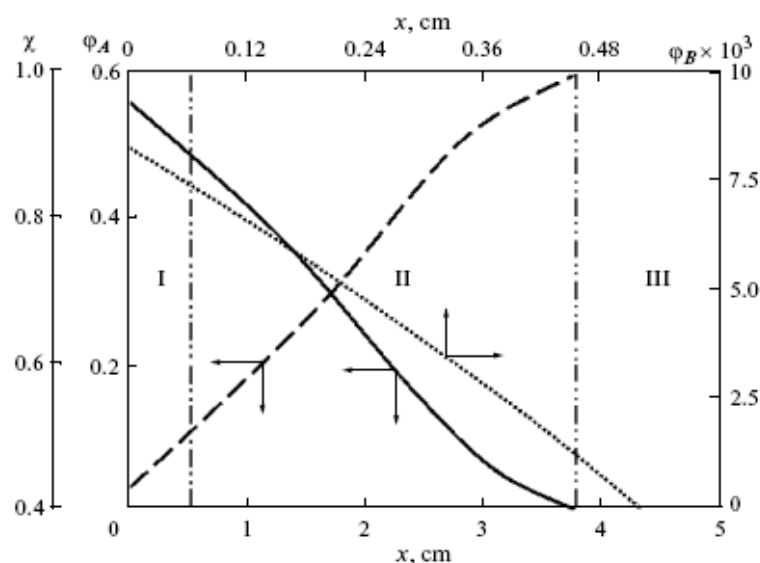


Fig. 2. Fractions of solid phases (solid line)  $\phi_A$  and (dotted line)  $\phi_B$  and (dashed line) liquid phase  $\chi$  vs. the spatial coordinate  $x = z - Vt$ . (I)–(III) Cotectic zone, parent mushy zone, and liquid phase, respectively (the zones are indicated by vertical lines normal to axis  $x$ ). The thermophysical parameters of the system are given in the table.

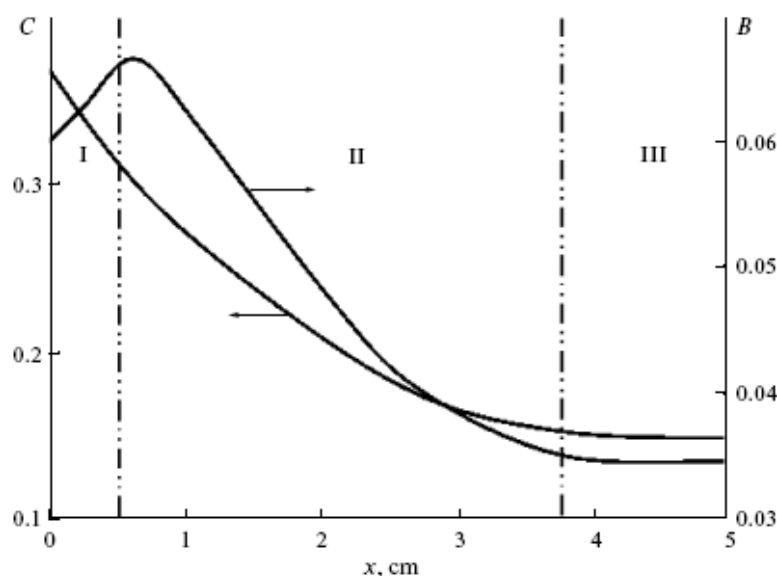


Fig. 3. Concentrations of impurities  $C$  and  $B$  vs. the spatial coordinate  $x = z - Vt$ . The notations and calculated parameters are given in Fig. 2;  $\delta_C = 0.53 \text{ cm}$  and  $\delta = 3.79 \text{ cm}$ .

Figure 3 shows the distributions of the impurity concentrations over the entire phase transition region. The main impurity component has concentration  $C(x)$  and decreases monotonically in zones I and II due to the rejection of the impurity by the solid phase growing in the system. In contrast to this dependence

(which has traditional behavior), the concentration of second-component impurity  $B(x)$  increases in the cotectic zone, intersects the boundary between zones I and II, reaches a maximum in the parent mushy zone, decreases in this zone and in the liquid phase, and tends toward initial concentration  $B_0$ . This unusual (at

Calculated parameters for the ternary  $\text{H}_2\text{O}-\text{KNO}_3-\text{NaNO}_3$  system borrowed from [47, 48] ( $B$  and  $C$  correspond to  $\text{NaNO}_3$  and  $\text{KNO}_3$ , respectively, according to the notations of [48])

$B_E$	0.06	$T_E(^{\circ}\text{C})$	-19	$L_V/k_S (\text{s}^{\circ}\text{C cm}^{-2})$	$1.52 \times 10^5$
$C_E$	0.37	$T_E^{AB} (^{\circ}\text{C})$	-5	$k_L/k_S$	0.25
$B_E^{AB}$	0.10	$T_M(^{\circ}\text{C})$	0	$G_S (^{\circ}\text{C cm}^{-1})$	5
$B_{\infty}$	0.035	$\kappa (\text{cm}^2 \text{s}^{-1})$	$1.1 \times 10^{-3}$	$G_L (^{\circ}\text{C cm}^{-1})$	0.5
$C_{\infty}$	0.152	$D_B (\text{cm}^2 \text{s}^{-1})$	$4.89 \times 10^{-6}$	—	—

first glance) behavior of impurity concentration  $B(x)$  is explained by the fact that component  $B$  undergoes a phase transition in zone I, which leads to a decrease in the concentration near the solid phase—eutectic zone interface. Note that analogous behavior of impurity concentration  $B(x)$  was obtained during the theoretical analysis of nonstationary self-similar solidification in [49–53] and the experimental investigation in [47]. In those works, however, the point of maximum was found at the interface between zones I and II. The maximum shifts toward zone II due to the fact that the authors of [49–53] used the approximated Scheil equations of impurity diffusion (equations without diffusion terms) [45, 46]. Therefore, the displacement of the maximum toward the parent mushy zone is explained by the effect of the diffusion transport of impurity  $B(x)$  in a real ternary system.

The theory proposed in this work describes the pulling of a crystal from a melt at a constant solidification rate (Czochralski growth technique) and can also describe the slow (almost steady) solidification processes at the interface of the internal (solid) Earth core that are responsible for geodynamo [54–56]. Moreover, the analytical solutions found in this work can be used to study the dynamic stability of the solidification of ternary systems (which is responsible for layer-by-layer impurity segregation) by analogy with the stability theory developed in [57–60] for binary melts.

#### ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported in part by the Russian Foundation for Basic Research (project no. 11-01-00137) and the Federal program Human Capital for Science and Education in Innovative Russia 2009–2013.

#### REFERENCES

1. R. Lauder and R. Parker, *The Growth of Single Crystals; Crystal Growth Mechanisms: Energetics, Kinetics and Transport* (Prentice-Hall, New York, 1970).
2. M. Flemings, *Solidification Processing* (McGraw-Hill, New York, 1974).
3. A. Ono, *Solidification of Metals* (Metallurgiya, Moscow, 1980).
4. G. P. Ivantsov, "Diffusion Supercooling during the Solidification of a Binary Alloy," *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 81 (2), 179–182 (1951).
5. Yu. A. Buyevich, D. V. Alexandrov, and D. V. Mansurov, *Macrokines of Crystallization* (Begell House, New York, 2001).
6. D. V. Alexandrov, A. G. Churbanov, and P. N. Vabishchevich, "Emergence of a Mushy Region in Processes of Binary Melt Solidification," *Int. J. Fluid Mech. Research* 26 (2), 248–264 (1999).
7. I. V. Alexandrova, D. V. Alexandrov, D. L. Aseev, and S. V. Bulitcheva, "Mushy Layer Formation during Solidification of Binary Alloys from a Cooled Wall: The Role of Boundary Conditions," *Acta Physica Polonica A* 115 (4), 791–794 (2009).
8. D. V. Alexandrov, "Incipience of a Mushy Zone in Binary Melt Solidification Processes," *Int. J. Fluid Mech. Research* 27 (2–4), 223–238 (2000).
9. D. V. Alexandrov, "On the Theory of the Nucleation of a Concentration Supercooling Mushy Zone," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* 392, 322–327 (2003).
10. J. Stefan, "Über die Theorie der Eisbildung, Insbesondere über die Eisbildung im Polarmeere," *Ann. Phys. Chem.* 42, 269–286 (1891).
11. W. W. Mullins and R. F. Sekerka, "Stability of a Planar Interface during Solidification of a Dilute Binary Alloy," *J. Appl. Phys.* 35, 444–451 (1964).
12. R. F. Sekerka, "A Stability Function for Explicit Evaluation of the Mullins–Sekerka Interface Stability Criterion," *J. Appl. Phys.* 36, 264–268 (1965).
13. R. F. Sekerka, "Morphological Stability," *J. Crystal Growth* 3–4, 71–81 (1968).
14. D. V. Alexandrov, V. V. Mansurov, and P. K. Galenko, "Morphological Stability of the Plane Interface of the Phases in a Binary Melt during High-Rate Solidification," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* 351, 37–39 (1996).
15. D. J. Wollkind and L. A. Segel, "A Nonlinear Stability Analysis of the Freezing of a Dilute Binary Alloy," *Philos. Trans. Roy. Soc. A* 268, 351–380 (1970).
16. D. V. Alexandrov, "A Nonlinear Instability Analysis of Crystallization Processes with a Two-Phase Zone," *J. Metast. Nanocryst. Mater.* 20–21, 468–475 (2004).
17. D. V. Alexandrov, P. K. Galenko, A. P. Malygin, and D. M. Herlach, "Selection of a Stable Growth Mode of a Parabolic Dendrite Tip during the Forced Convective Flow and Solidification of a Binary Liquid," *Vestn. Udmurt. Univ.* 1, 3–16 (2010).

18. D. V. Alexandrov, P. K. Galenko, and D. M. Herlach, "Selection Criterion for the Growing Dendritic Tip in a Non-Isothermal Binary System under Forced Convective Flow," *J. Crystal Growth* 312, 2122–2127 (2010).
19. D. L. Aseev and D. V. Aleksandrov, "Nonlinear Solidification Dynamics of Binary Melts with a Nonequilibrium Mushy Zone," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* 408, 609–613 (2006).
20. D. L. Aseev and D. V. Alexandrov, "Directional Solidification of Binary Melts with a Non-Equilibrium Mushy Layer," *Int. J. Heat Mass. Transfer* 49, 4903–4909 (2006).
21. D. V. Alexandrov, D. L. Aseev, and A. P. Malygin, "On the Theory of the Solidification Processes with a Non-equilibrium Mushy Zone," *Rasplavy* 1, 16–30 (2011).
22. M. G. Worster, "Solidification of an Alloy from a Cooled Boundary," *J. Fluid Mech.* 167, 481–501 (1986).
23. D. V. Alexandrov, "The Effect of Concentrational Supercooling on the Morphological Stability of Self-similar Solidification with a Planar Front," *Doklady Physics* 46, 453–458 (2001).
24. D. V. Alexandrov, "Absolute Morphological Stability of the Self-Similar Solidification with a Planar Front," *J. Metast. Nanocryst. Mater.* 20–21, 476–481 (2004).
25. D. V. Alexandrov, "Self-Similar Solidification: Morphological Stability of the Regime," *Int. J. Heat Mass Transfer* 47, 1383–1389 (2004).
26. D. V. Alexandrov and D. L. Aseev, "Effect of Thermodiffusion on the Morphological Stability of Self-Similar Solidification with a Plane Front," *Rasplavy* 2, 50–62 (2005).
27. D. V. Alexandrov, A. A. Ivanov, and A. P. Malygin, "On the Theory of Nonstationary Solidification in the Presence of a Mushy Zone," *Rasplavy* 5, 69–76 (2008).
28. D. V. Alexandrov, A. A. Ivanov, and A. P. Malygin, "Self-Similar Solidification with a Two-Phase Zone from a Cooled Wall," *Vestn. Udmurt. Univ.* 1, 14–25 (2008).
29. D. V. Alexandrov, A. A. Ivanov, and A. P. Malygin, "Self-Similar Solidification of Binary Alloys," *Acta Physica Polonica A* 115, 795–799 (2009).
30. D. V. Alexandrov and A. A. Ivanov, "Dynamic Stability Analysis of the Solidification of Binary Melts in the Presence of a Mushy Region: Changeover of Instability," *J. Cryst. Growth* 210, 797–810 (2000).
31. R. N. Hills, D. E. Loper, and P. H. Roberts, "A Thermodynamic Consistent Model of a Mushy Zone," *Q. J. Mech. Appl. Math.* 36, 505–539 (1983).
32. V. T. Borisov, "Theory of the Two-Phase Zone of a Metallic Ingot" (*Metallurgiya*, Moscow, 1987).
33. D. V. Alexandrov, "Solidification with a Quasiequilibrium Mushy Zone: Exact Analytical Solution," *Int. J. Fluid. Mech. Res.* 27 (2–4), 213–222 (2000).
34. D. V. Alexandrov, "On the Theory of Solidification with a Quasi-Equilibrium Two-Phase Zone," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* 375 (2), 172–176 (2000).
35. D. V. Alexandrov, "Solidification with a Quasiequilibrium Mushy Zone: Exact Analytical Solution of Nonlinear Model," *J. Cryst. Growth* 222, 816–821 (2001).
36. D. V. Alexandrov and D. L. Aseev, "One-Dimensional Solidification of an Alloy with a Mushy Zone: Thermodiffusion and Temperature-Dependent Diffusivity," *J. Fluid. Mech.* 527, 57–66 (2005).
37. D. V. Alexandrov and D. L. Aseev, "Directional Solidification with a Two-Phase Zone: Thermodiffusion and Temperature-Dependent Diffusivity," *Comp. Mater. Soc.* 37, 1–6 (2006).
38. D. L. Aseev and D. V. Alexandrov, "Unidirectional Solidification with a Mushy Layer. The Influence of Weak Convection," *Acta Mater.* 54, 2401–2406 (2006).
39. D. V. Alexandrov and A. P. Malygin, "Analytical Description of the Crystallography of Sea Water in Ice Cracks and Their Effect on the Ocean–Atmosphere Heat Exchange," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* 411 (3), 390–394 (2006).
40. D. V. Alexandrov, D. L. Aseev, I. G. Nizovtseva, et al., "Nonlinear Dynamics of Directional Solidification with a Mushy Layer. Analytic Solutions of the Problem," *Int. J. Heat Mass Transfer* 50, 3616–3623 (2007).
41. D. V. Alexandrov, I. G. Nizovtseva, A. P. Malygin, et al., "Unidirectional Solidification of Binary Melts from a Cooled Boundary: Analytical Solutions of a Nonlinear Diffusion-Limited Problem," *J. Phys.: Condens. Matter* 20, 114105–01–06 (2008).
42. D. V. Alexandrov, I. G. Nizovtseva, D. Lee, and H.-N. Huang, "Solidification from a Cooled Boundary with a Mushy Layer under Conditions of Nonturbulent and Turbulent Heat and Mass Transfer in the Ocean," *Int. J. Fluid Mech. Research* 37, 1–14 (2010).
43. D. V. Alexandrov and I. G. Nizovtseva, "Nonlinear Dynamics of the False Bottom during the Solidification of Sea Water," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* 419, 262–265 (2008).
44. D. V. Alexandrov and I. G. Nizovtseva, "To the Theory of Underwater Ice Evolution, or Nonlinear Dynamics of 'False Bottoms,'" *Int. J. Heat Mass Transfer* 51, 5204–5208 (2008).
45. E. Scheil, "Bemerkungen zur Schichtkristallbildung," *Zeitschrift für Metallkunde* 34, 70–72 (1942).
46. R. C. Kerr, A. W. Woods, M. G. Worster, and H. E. Huppert, "Solidification of an Alloy Cooled from above. Part 1. Equilibrium Growth," *J. Fluid Mech.* 216, 323–342 (1990).
47. A. Aitta, H. E. Huppert, and M. G. Worster, "Diffusion-Controlled Solidification of a Ternary Melt from a Cooled Boundary," *J. Fluid Mech.* 432, 201–217 (2001).
48. D. M. Anderson, "A Model for Diffusion-Controlled Solidification of Ternary Alloys in Mushy Layers," *J. Fluid Mech.* 483, 165–197 (2003).
49. D. V. Alexandrov and A. A. Ivanov, "The Stefan Problem of Solidification of Ternary Systems in the Presence of Moving Phase Transition Regions," *J. Exp. Theor. Phys.* 135 (5) 922–930 (2009).
50. D. V. Alexandrov and A. A. Ivanov, "Analytical Solution for a Problem of Directional Solidification in Ternary System," *Acta Physica Polonica A* 115, 786–790 (2009).
51. D. V. Alexandrov, "Nonlinear Dynamics of Solidification of Three-Component Systems," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* 422 (3), 322–326 (2008).



52. D. V. Alexandrov and A. A. Ivanov, "Nonlinear Dynamics of Directional Solidification of Ternary Solutions with Mushy Layers," *Heat Mass Transfer* **45**, 1467–1472 (2009).
53. D. V. Alexandrov and A. A. Ivanov, "Solidification of a Ternary Melt from a Cooled Boundary, or Nonlinear Dynamics of Mushy Layers," *International Journal of Heat and Mass Transfer* **52**, 4807–4811 (2009).
54. B. A. Buffett, "Earth's Core and the Geodynamo," *Science* **288**, 2007–2012 (2007).
55. S. Fedotov, I. Bashkirtseva, and L. Ryashko, "Stochastic Dynamo Model for Subcritical Transition," *Phys. Rev. E* **73**, 066307–066311 (2006).
56. S. Fedotov, I. Bashkirtseva, and L. Ryashko, "Stochastic Analysis of Subcritical Amplification of Magnetic Energy in a Turbulent Dynamo," *Physica A* **342**, 491–506 (2004).
57. D. V. Alexandrov and V. V. Mansurov, "Dynamic Instability of the Quasi-Stationary Solidification of a Binary Melt in the Presence of a Narrow Quasi-Equilibrium Mushy Zone," *Kristallografiya* **41** (2), 376–378 (1996).
58. D. V. Alexandrov and V. V. Mansurov, "Dynamic Stability of a Solidification Process of a Binary Melt in the Presence of a Broad Quasiequilibrium Mushy Region," *Scripta Materialia* **35**, 787–790 (1996).
59. D. V. Alexandrov and V. V. Mansurov, "Dynamic Instability of the Quasi-Stationary Solidification of a Binary Melt in the Presence of a Broad Quasi-Equilibrium Mushy Zone," *Kristallografiya* **42** (3), 402–404 (1997).
60. D. V. Alexandrov, "Linear Analysis of Dynamic Instability of Solidification with a Quasiequilibrium Mushy Zone," *Int. J. Fluid Mech. Research* **27** (2–4), 239–247 (2000).

## Копии экспертных заключений

УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по научной работе  
ГОУ ВПО «УрГУ»



**Экспертное заключение  
о возможности опубликования**

Я, председатель экспертной комиссии (или руководитель-эксперт)  
математико-механического факультета  
(наименование подразделения)

Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Уральский государственный университет им. А.М.Горького»,  
рассмотрев статью Малыгина А.П., Александрова Д.В. «Конвективная неустойчивость фронта затвердевания. Модели двухфазной зоны» 42 стр.

(Ф.И.О. автора, вид, название материала, количество листов)

подтверждаю, что в материале не содержатся сведения, относящиеся к государственной тайне. Материал не патентоспособен и не содержит сведений конфиденциального характера и «ноу-хау».

На публикацию материалов не следует  
(следует ли)

получить разрешение \_\_\_\_\_  
(организации, данный пункт вводится при необходимости)

Закключение: это позволяет мне сделать заключение, что рассмотренный материал может быть опубликован в открытой печати и вывезен за границу для опубликования

Председатель комиссии (руководитель-эксперт) \_\_\_\_\_ М.О. Асанов  
Декан математико-механического факультета \_\_\_\_\_  
(должность, подпись, инициалы и фамилия)

Главный специалист ОНТИ УНИ \_\_\_\_\_ Н.П. Невраева  
(подпись)

Начальник Первого отдела \_\_\_\_\_ А.Г. Гришин  
(подпись)

УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по научной работе  
ГОУ ВПО «УрГУ»

  
(подпись) А.О. Иванов  
«11» мая 2011 г.  


**Экспертное заключение  
о возможности опубликования**

Я, председатель экспертной комиссии (или руководитель-эксперт)  
математико-механического факультета  
(наименование подразделения)


Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Уральский государственный университет им. А.М.Горького»,  
рассмотрев статью Александров Д.В., Малыгина А.П. «Линейный анализ устойчивости затвердевания с областью фазового перехода», 41 стр.  
(Ф.И.О. автора, вид, название материала, количество листов)

подтверждаю, что в материале не содержатся сведения, относящиеся к государственной тайне. Материал не патентоспособен и не содержит сведений конфиденциального характера и «ноу-хау».

На публикацию материалов \_\_\_\_\_ не следует  
(следует ли)

получить разрешение \_\_\_\_\_  
(организации, данный пункт вводится при необходимости)

Закключение: это позволяет мне сделать заключение, что рассмотренный материал  
может быть опубликован в открытой печати и вывезен за границу для опубликования

Председатель комиссии (руководитель-эксперт)  
Декан математико-механического факультета  М.О. Асанов  
(должность, подпись, инициалы и фамилия)

Главный специалист ОНТИ УНИ \_\_\_\_\_ Н.П. Невраева  
(подпись)

Начальник Первого отдела \_\_\_\_\_ А.Г. Гришин  
(подпись)



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе  
ГОУ ВПО «УрГУ»

А.О. Иванов

подпись

2011 г.

**Экспертное заключение  
о возможности опубликования**

Я, председатель экспертной комиссии (или руководитель-эксперт)

математико-механического факультета

(наименование подразделения)

Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Уральский государственный университет им. А.М.Горького», рассмотрев статью Иванова А.А., Малыгина А.П., «Нелинейные эффекты при направленной кристаллизации трехкомпонентных расплавов с образованием двухфазных зон», 37 страниц

(Ф.И.О. автора, вид, название материала, количество листов)

подтверждаю, что в материале не содержатся сведения, относящиеся к государственной тайне. Материал не патентоспособен и не содержит сведений конфиденциального характера и «ноу-хау».

На публикацию материалов не следует  
(следует ли)

получить разрешение \_\_\_\_\_  
(организации, данный пункт вводится при необходимости)

Закключение: это позволяет мне сделать заключение, что рассмотренный материал может быть опубликован в открытой печати и вывезен за границу для опубликования

Председатель комиссии (руководитель-эксперт)

Декан математико-механического факультета

(должность, подпись, инициалы и фамилия)

М.О. Асанов

Главный специалист ОНТИ УНИ

(подпись)

Н.П. Невраева

Начальник Первого отдела

(подпись)

А.Г. Гришин





Contents lists available at SciVerse ScienceDirect

## Physics of the Earth and Planetary Interiors

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/pepi](http://www.elsevier.com/locate/pepi)

## Coupled convective and morphological instability of the inner core boundary of the Earth

D.V. Alexandrov\*, A.P. Malygin

Department of Mathematical Physics, Ural State University, Ekaterinburg 620083, Russian Federation

## ARTICLE INFO

## Article history:

Received 27 April 2011

Received in revised form 22 July 2011

Accepted 10 August 2011

Available online 17 August 2011

Edited by Mark Jellinek

## Keywords:

Inner core boundary

Morphological instability

Constitutional supercooling

Mushy layer

Slurry layer

Nucleation

## ABSTRACT

Taking into account the convective heat and mass transfer in the liquid phase, we develop the linear theory of morphological instability of the solid–liquid interface under solidification conditions typical for the inner core. The generalized stability criterion obtained includes analytic results of the recent theories [Shimizu, H., Poirier, J.P., Le Mouél, J.L., 2005. *Phys. Earth Planet. Int.* 151, 37–51; Deguen, R., Alboussière, T., Brito, D., 2007. *Phys. Earth Planet. Int.* 164, 36–49], where the role of convection on stability was only partially studied. The generalized criterion shows that both regimes of stable and unstable solidification are quite plausible if the growth rate of the inner core is episodic and variable. This stability criterion and the criterion of constitutional supercooling demonstrate that there are two possible solidification scenarios: “constitutional supercooling and morphological stability” and “constitutional supercooling and morphological instability”. These crystallization regimes are described by means of the slurry and mushy layer theories. Two models of solidification in the presence of convective motions near the inner core boundary with the slurry and mushy layers are considered. New analytical solutions of these nonlinear models with two moving boundaries of the phase transition domain in the steady-state crystallization regime are found.

© 2011 Elsevier B.V. All rights reserved.

## 1. Introduction

The seemingly trivial problem of the Earth's core solidification comes under the rubric of so-called Stefan problems complicated by different physical mechanisms and processes in the inner and outer cores. Their rich nonlinear behavior has attracted substantial interest, and their ubiquity in fields ranging from geophysics to metallurgy stimulates continual rediscovery of Stefan's work (Stefan, 1891). However, in the case of the Earth's core dynamics, there are some principal differences between the laboratory and field conditions met in metallurgy and geophysics of polar regions, and those existing at the inner core boundary (ICB). It is well-known that the liquid metal (mainly iron–nickel) solidifies from the ICB bounding the present-day inner core (Buffett, 2000; Editorial, 2005). This part of the core is solid, whereas the outer part is liquid with a small quantity of lighter elements. Their concentration is greater in the outer core than in the inner core due to the solidification process (Anderson and Ahrens, 1994). This buoyant material is responsible for the core convection (Braginsky, 1963): light elements rise into the fluid outer core, while denser elements solidify into the inner core. Generally speaking, fluid motions within the outer core are influenced by Lorentz, Coriolis and buoyancy forces each of which suppresses possible turbulence (Loper, 2000).

Therefore, convective motions in the outer core can be considered as not turbulent in the first approximation. It is possible that these motions consist of narrow upwellings and broad downwellings (Loper, 1989). Such fluid flows (~10 km per year (Bloxxham and Jackson, 1991)) near the surface of Earth's outer core are sufficient to sustain Earth's magnetic field by means of a mechanism of the geodynamo. So, the thermal and compositional convection mechanisms play an important role in the geodynamo problem: the first of them probably contributes about 80% and the second about 20% (Buffett, 2000). A more complete literature survey on this subject and the linkage between problems of the Earth's magnetic field, solidification and convection in the outer core is given by Buffett (2000).

The rejection of light elements from the ICB into the molten iron alloy caused by the crystallization process of the inner core is responsible for the constitutional supercooling (Loper and Roberts, 1978, 1981; Fearn et al., 1981). Generally speaking, solidification processes are frequently accompanied by the appearance of supercooled regions, i.e., regions in the liquid phase, the temperature of which is lower than the phase transition temperature, which depends on the local impurity concentration, phase transition temperature of the pure melt and other factors. There exist two principal mechanisms of the appearance of the above regions (Buyevich et al., 2001). The first mechanism works for rather high-rate removal of heat from the outer surface, when the dimensions of the space occupied by the melt in the direction of motion

\* Corresponding author.

E-mail address: [Dmitri.Alexandrov@usu.ru](mailto:Dmitri.Alexandrov@usu.ru) (D.V. Alexandrov).



## Convective instability of directional crystallization in a forced flow: The role of brine channels in a mushy layer on nonlinear dynamics of binary systems

D.V. Alexandrov\*, A.P. Malygin

Ural State University, Department of Mathematical Physics, Lenin Ave. 51, Ekaterinburg 620083, Russian Federation

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 10 June 2010

Received in revised form 31 August 2010

Accepted 9 November 2010

Available online 3 December 2010

#### Keywords:

Crystallization

Solid–liquid phase transitions

Mushy layer

Sea ices

Brine channels

### ABSTRACT

The linear analysis of morphological instability of the crystallization process with a mushy layer is carried out. The instability is caused by the influence of a forced oceanic flow leading to the formation of brine channels in the anisotropic and heterogeneous phase transition domain. Two instability criteria are found for the cases of non-turbulent and turbulent boundary conditions at the mushy layer–ocean interface. The theory under consideration shows that the instability domain will depend highly on the physical and operating parameters of the system.

© 2010 Elsevier Ltd. All rights reserved.

### 1. Introduction

Directional and bulk crystallization of liquids underlies many technologies employed in traditional and new industries (metallurgy, energetics, aerospace engineering, electronics) and describes natural phenomena (formation of ices, solidification of lava-streams, crystal growth in supersaturated solutions). In spite of the extended history of the study of crystallization, many aspects of the physics of this phenomenon remain unclear. Aspects of forming of various types of micro- and macrostructures in solids and liquids, the physical mechanisms of which remain to a large degree unclear, are of particular importance. Traditionally the study of crystallization was and is performed within the framework of the classical model, leading to the Stefan boundary value problem [1,2]. In this approach it is assumed that the liquid and solid phases are separated by a clearly expressed smooth interface between the phases, heat transfer occurs by conduction according to the Fourier law and the velocity of the crystallization front is controlled by the absorption of heat by the solid phase. The mathematical formulations corresponding to these physical models belong to the class of highly-nonlinear problems with moving boundaries. In spite of the appreciable progress attained in investigating these problems, it became clear during the past several years that this approach is limited. This is because the developments of experimental data on materials with specified properties necessitate investigating a number of new dynamic phenomena

typical of the crystallization process. These phenomena include the formation of cellular and dendritic structures and the formation of transition two-phase (mushy) regions that separate the crystal and the liquid.

In addition, it has been currently recognized that in order to explain the real structure of solids it is necessary to take account of the actual supercooling of the liquid and the consequence of the appearance of metastability. Analysis of available data allows singling out several fundamental, theoretical and applied problems. Firstly, the colossal complexity of the physical problems that arise when making allowance for phase transitions requires developing a radically new approach to constructing models of crystallization, which would include various kinds of nonlinear phenomena. An important role among these are nucleation, fluid flows, convection and evolution of a new phase in a metastable medium, which by themselves require refining of established and developing new approaches. Secondly, this gives rise to the need of a mathematical formulation of the corresponding mathematical models, which requires establishing new classes of crystallization problems and developing methods for investigating them.

A number of important contributions to the study of these problems have been made previously. Ivantsov [3] demonstrated that, under certain conditions, a region of impurity-induced supercooling, i.e., one in which the temperature is lower than the temperature of the phase transition, forms in the melt. Subsequent to this, a relationship between this phenomenon and the structure of the solid and liquid phases was rather rapidly recognized, which has brought about intensive studies of the crystallization dynamics. Mathematical models of solidification are complicated by the need

\* Corresponding author.

E-mail address: [Dmitri.Alexandrov@usu.ru](mailto:Dmitri.Alexandrov@usu.ru) (D.V. Alexandrov).



## Time-dependent crystallization in magma chambers and lava lakes cooled from above: The role of convection and kinetics on nonlinear dynamics of binary systems

D.V. Alexandrov\*, A.V. Natreba, A.P. Malygin

Urals State University, Department of Mathematical Physics, Lenin ave. 51, Ekaterinburg 620083, Russian Federation

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 28 April 2011

Received in revised form 6 September 2011

Accepted 20 September 2011

Available online 14 October 2011

#### Keywords:

Solidification

Solid–liquid phase transitions

Mushy layer

Magma chambers

Lava lakes

### ABSTRACT

Motivated by geophysical applications we develop a number of mathematical models of the time-dependent crystallization in magma chambers, lava lakes and similar systems which involve nonlinear mechanisms of the melt convection and interfacial kinetics. The Stefan-type moving boundary models including important nonlinear physical dependences are solved analytically for different solidification stages. An influence of the convection intensity and undercooling degree on nonlinear solidification dynamics is discussed.

© 2011 Elsevier Ltd. All rights reserved.

### 1. Introduction

It is well-known that magma chambers represent reservoirs of molten rock material beneath the earth's surface that are supposed to exist a few kilometers beneath all volcanoes, of both the subaerial and submarine variety. The depth to the top of the chambers can be about 2 km below the seafloor; the width can be probably 1–4 km. Their thickness seems to be about 2–6 km on the basis of studies of ophiolites (e.g., note that magma chambers have been detected beneath the crest of the East Pacific Rise [1]). Some of the magma chambers are staging areas for volcanic eruptions; others have no link to the Earth's surface and in cooling solidify to form coarse-grained plutons. Note that the terrestrial magma chamber is the molten outer core; its magma is impounded by its sheer density. The mantle contains numerous magma chambers, but its constant stirring and inaccessibility precludes direct observations [2]. Therefore our knowledge is essentially based on theoretical approaches and measurements from the occasional outpourings from such chambers (see, for example, Fig. 1 in [3]).

Magma chambers can be connected to the earth's surface by a vent where magma is extruded onto the surface as lava. This process leads to the formation of lava lakes. Active lava lakes are open volcanic systems, where lava circulates between a magma chamber and the surface. Some lava lakes disappear into their craters; others may be fed with new hot lava pouring up from below

Earth's surface. Sooner or later, the lava's channel collapses, stopping the flow of more lava. Trapped by the terrain into depressions or pools, lava may remain fluid rather than solidifying. Therefore the solidification process occurs from the top of the lava lake caused by cooling through its upper boundary with overlying air or seawater. A lava lake solidifies not only from the top; also, this process occurs from its base due to the thermal flux going through the underlying country rock. Note that lava lakes are typical phenomena in the Solar system [4,5].

Keeping in mind different physical conditions of crystallization processes in magma chambers and lava lakes, metallurgy, crystal growth and geophysics of Polar Regions, let us emphasize similar physical behavior and mathematical models of all aforementioned solidifying systems. From this point of view, the theory under consideration describes different processes and phenomena met in nature, laboratory experiments and industrial applications.

The present study connected with the growth of a solid from a cooled boundary comes under the rubric of so-called Stefan problems. Their rich nonlinear behavior has attracted substantial interest of mathematical physics [6,7], and their ubiquity in fields ranging from geophysics to metallurgy stimulates continual rediscovery of Stefan's work with special attention to different physical phenomena and processes. Stefan describes the problem of the freezing of a column of ice in contact with a column of water of a high temperature including analyses of field observations by various authors in pioneering papers [8,9]. Nowadays his model with a planar solidification front is known as the Stefan model. The planar

\* Corresponding author.

E-mail address: [Dmitri.Alexandrov@usu.ru](mailto:Dmitri.Alexandrov@usu.ru) (D.V. Alexandrov).





## Flow-induced morphological instability and solidification with the slurry and mushy layers in the presence of convection

D.V. Alexandrov\*, A.P. Malygin

Ural Federal University, Department of Mathematical Physics, Lenin ave. 51, Ekaterinburg 620000, Russian Federation

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 25 October 2011

Received in revised form 16 December 2011

Accepted 16 February 2012

#### Keywords:

Convective instability

Solidification

Solid–liquid phase transitions

Mushy layer

Slurry layer

### ABSTRACT

The linear analysis of convective morphological instability of the planar liquid–solid phase transition boundary is developed. The new stability criterion, dependent on the main parameter–extension rate (proportional to the vertical derivative of the fluid velocity), is deduced. This criterion generalizes analytical results of the recent works [H. Shimizu, J.P. Poirier, J.L. Le Mouél, *Phys. Earth Planet. Inter.* 151 (2005) 37–51; R. Deguen, T. Alboussière, D. Brito, *Phys. Earth Planet. Inter.* 164 (2007) 36–49], where convective mechanisms were only partially introduced in the model equations and stability analysis. The convective stability criterion demonstrates that the neutral stability curve divides two possible domains of morphologically stable and unstable solidification. These domains existing in the constitutionally supercooled conditions lead to two different crystallization scenarios “constitutional supercooling + morphological stability” and “constitutional supercooling + morphological instability”, which are described by idealized nonlinear slurry and mushy layer models with convection. Analytical solutions of these models taking into account nucleation and kinetic mechanisms of the growing solid phase are constructed for the steady-state solidification conditions.

© 2012 Elsevier Ltd. All rights reserved.

### 1. Introduction

The dynamics of phase interfaces plays an important role in spontaneous formation of naturally occurring structures. It is responsible for the existence of a large variety of interfaces between liquids in fluid dynamics, dome-shaped and cellular shapes of flame in combustion, lamellar, stratified and dendritic structures in crystal growth processes. Studies of these phenomena are pursued very intensively and it is hence impossible to present any exhaustive survey of the entire variety of structures associated with the behavior of phase interfaces. For this reason we shall restrict ourselves here to referring the reader to the excellent studies described in [1–4], where one can find a more or less detailed bibliography.

One of the most important types of aforementioned phase interfaces frequently met in geophysics and metallurgy, in the production of semiconductor and optical materials and in chemical technology is the solid–liquid phase transition interface (the crystallization front). This is so because the structure of the solid obtained by crystallization from a melt or from a solution depends cardinally on the nature of motion and on the shape of the phase interface. In particular, the dynamics of the crystallization front controls the formation of the transverse and longitudinal impurity

stratification in metals and semiconductors [5–7] and the formation of complex dendritic and columnar structures in sea ices [8,9].

In some cases the macrostructure in the form of impurity stratification is detrimental to the mechanical and electrical properties of metals, and also of instruments and structural elements manufactured of these materials. In other cases the impurity liquation is used for manufacturing materials with specified properties. On the other hand, the presence of dendrites usually causes accumulation of impurities in the interdendritic space and a specific distribution of impurities in the solid phase. For this reason interest in experimental and theoretical study of directional solidification as well as in modeling of dynamic phenomena in geophysical and metallurgical processes for establishing the properties of the resultant solids continues unabated.

The aforementioned solid structures arising ahead of the planar solid–liquid interface stem from instability of this interface with respect to perturbations of its shape and formation of a metastable two-phase region. The problem of stability with respect to infinitesimal perturbations was solved for the first time by Mullins and Sekerka, employing the linear theory of stability [10–13]. Then their technique was widely extended to different physical situations (see, among others, [14–23]). Let us note the principal role of convection on the stability analysis. From the physical point of view, convection leads to a redistribution of the temperature and concentration profiles and, as a consequence, it changes the degree of the supercooling. So, for example, the steady-state convection in

\* Corresponding author.

E-mail address: [DmitriAlexandrov@usu.ru](mailto:DmitriAlexandrov@usu.ru) (D.V. Alexandrov).





## The steady-state solidification scenario of ternary systems: Exact analytical solution of nonlinear model

D.V. Alexandrov\*, A.P. Malygin\*

Ural Federal University, Department of Mathematical Physics, Lenin ave. 51, Ekaterinburg 620083, Russian Federation

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 11 October 2011

Received in revised form 18 January 2012

Accepted 21 February 2012

#### Keywords:

Solidification

Mushy layer

Ternary alloy

Primary layer

Cotectic layer

### ABSTRACT

A mathematical model describing the steady-state solidification of ternary systems with mushy layers (primary and cotectic) is formulated: solidification along a liquidus surface is characterized by a primary mushy layer, and solidification along a cotectic line is characterized by a secondary (cotectic) mushy layer. Exact analytical solutions of the model under consideration are found in a parametric form (thicknesses of mushy layers, growth rate of their boundaries, temperature and composition fields, solid fractions are determined in an explicit form). The velocity of solidification is completely determined by temperature gradients in the solid and liquid phases. This velocity coincides with similar expressions describing binary melt solidification with a planar front or a mushy layer. It is shown that the liquid composition of the main component decreases in the cotectic and primary layers, whereas the second (cotectic) composition increases in the cotectic layer, attains a maximum point and decreases in the primary layer.

© 2012 Elsevier Ltd. All rights reserved.

### 1. Introduction

The constitutional supercooling arising under certain circumstances ahead of the planar phase transition interface [1] and its morphological instability [2–4] cause a system of elements of the solid phase in the form of dendrites, columnar and uniaxial crystals to appear in the supercooled melt [5–7]. The development of this system reduces the supercooling and leads to formation of a new stable solidification mode characterized by the presence of a mushy (two-phase) layer that separates the solid phase and the melt. The study of relationships governing solidification in the presence of a mushy region is rather complicated. This happens because it is necessary to investigate the interaction of nonlinear heat and mass transfer in the case of moving phase transition boundaries. For binary alloys, an exact analytical description of the steady-state solidification scenario with a mushy layer has been given for the first time in Refs. [8–10] by means of a new approach. This method of integration of the nonlinear heat and mass transfer equations connected with the transition to a new variable–solid fraction in the mushy layer will be developed in the present study for ternary systems. Hereafter, the theory of Refs. [8–10] has been further refined in order to take into account thermodiffusion and temperature-dependent diffusivity effects [11,12] as well as the influence of weak convection [13] and nonlinear liquidus equation

[14]. Also note that approximate analytical approaches have been developed for the description of the self-similar [15,16] and unsteady-state [17,18] solidification regimes of binary systems.

It is well-known that a wide variety of processes met in geophysics and metallurgy involve the solidification of multicomponent melts (e.g., solidification of magmas [19], casting of metals [20] and crystal growth processes [21]). Directional and bulk solidification of different components of the system leads to variations in both the composition and temperature gradients near the phase transition interface. As in the case of binary melts, this gives rise to the formation of one (in the case of a binary melt) or more (in the case of a multicomponent melt) mushy layers between the pure solid and liquid phases [22]. Let us emphasize that as the number of components in a system increases, the range of possible behaviors increases as well [23] (e.g., compare dynamics of concentration profiles in binary and ternary melts [4,24]). The complexity of nonlinear interactions between the heat and mass transfer processes in mushy layers increases with the number of components of a multicomponent melt. Hence, a ternary melt or solution of three chemically distinct components represents a test system showing the main features of a multicomponent solidification in comparison with a binary system.

A recent investigation of the crystallization of a three-component solution begun in Ref. [25]. In that study, a three-component system was cooled from below and all convection was suppressed due to the fact that the buoyancy of the fluid released on solidification always increased (a possible influence of convection on solidification of ternary systems has been discussed in

\* Corresponding authors.

E-mail addresses: [Dmitri.Alexandrov@usu.ru](mailto:Dmitri.Alexandrov@usu.ru) (D.V. Alexandrov), [Alexey.Malygin@usu.ru](mailto:Alexey.Malygin@usu.ru) (A.P. Malygin).

# Thermodynamic model of nonequilibrium phase transitions

L. M. Martyushev\* and M. S. Kononov

*Institute of Industrial Ecology, Russian Academy of Sciences, 20A Sophy Kovalevskaya Street, 620219 Ekaterinburg, Russia and  
Ural Federal University, 19 Mira Street, Ekaterinburg 620002, Russia*

(Received 11 April 2011; published 11 July 2011)

Within the scope of a thermodynamic description using the maximum entropy production principle, transitions from one nonequilibrium (kinetic) regime to another are considered. It is shown that in the case when power-law dependencies of thermodynamic flux on force are similar for two regimes, only a transition accompanied by a positive jump of thermodynamic flux is possible between them. It is found that the difference in powers of the dependencies of thermodynamic fluxes on forces results in a number of interesting nonequilibrium transitions between kinetic regimes, including the reentrant one with a negative jump of thermodynamic flux.

DOI: 10.1103/PhysRevE.84.011113

PACS number(s): 05.70.Ln

## I. INTRODUCTION

Equilibrium phase transitions have been comprehensively studied for a long time. These include transitions from one thermodynamic phase to another when changing thermodynamic parameters. Transitions from crystal to liquid (melting) and further to vapor (boiling) at the increase of temperature serve as typical examples. These transitions are conventionally divided into first-order and second-order transitions depending on the discontinuity or continuity of the change in several thermodynamic parameters during a phase transition (particularly, the specific volume changes stepwise during a first-order transition and remains continuous during a second-order transition). Transitions from one nonequilibrium process (regime, phase) to another with the variation of a controlling parameter are commonly referred to as kinetic or nonequilibrium transitions [1,2]. It is most obvious to choose thermodynamic force as such a parameter within the scope of the thermodynamic description. There are a lot of examples of nonequilibrium transitions. Particular, examples are (i) the transition from bubble to film boiling or from thermal conduction to convection heat transfer when increasing the temperature gradient, (ii) nonequilibrium crystallization accompanied by the change of crystal growth kinetics and morphology when varying supersaturation or supercooling, (iii) transitions from one type of plasma discharge to another when changing voltage, and (iv) a transition from laminar to turbulent flux when changing the pressure gradient.

The investigation of general regularities of nonequilibrium transitions has still not reached the level of maturity that is observed when studying equilibrium transitions and is in many ways conducted by analogy with its “elder counterpart.” Particularly, it features frequent use of the same division between first- and second-order transitions based on the discontinuity or continuity of the change in one or another transition parameter, plotting of phase (nonequilibrium, morphological) diagrams, and employment of such notions as “binodal” (limits of phase absolute stability), “metastable region,” “spinodal” (limits of phase absolute instability), and “critical point” (for example, see [3–11]).

The most important question of the “analogy-based construction” of the thermodynamic theory of nonequilibrium transitions is as follows: what can be considered as an analog of thermodynamic potential for a nonequilibrium transition? If this question is not solved, the development of the thermodynamic theory of nonequilibrium transitions will only be of a terminological, largely superficial nature, and it will be impossible to derive any constructive mathematical approach similar, for instance, to Landau’s theory of equilibrium phase transitions. As a reminder, the concept of thermodynamic potentials has become fully embedded in the physics of equilibrium phase transitions after the introduction of entropy and the formulation of the second law of thermodynamics: statements on the maximum entropy in an isolated system. Time (or rate) is the most important characteristic of nonequilibrium processes. Entropy and time form a well-known value in nonequilibrium thermodynamics: entropy production. As a consequence, a hypothesis on the use of the entropy production as a nonequilibrium potential has been advanced in a number of works [3,4,8–14]. Essentially, this hypothesis can be formulated as follows [9], [14]: a necessary condition for a nonequilibrium transition is a larger entropy production in the final nonequilibrium phase, and the equality of the entropy production of two nonequilibrium phases determines the binodal of the transition. The given hypothesis is substantially based on the so-called maximum entropy production principle, which has been theoretically developed and successfully applied in various domains of physics and chemistry (see overview in [14–18]) for more than 50 years. This principle can be most generally formulated as follows [14]: at each level of description, with preset external constraints, the relationship between the cause and the response of a nonequilibrium system is established in order to maximize the entropy production.

Using the given hypothesis, analytical calculations of a transition point from one nonequilibrium growth pattern to another have been carried out for a number of crystals when changing supercooling, and these calculations have found quantitative confirmation in the experiment [8,13].<sup>1</sup> A distinctive feature

\*LeonidMartyushev@gmail.com

<sup>1</sup>It is obvious that this approach used for nonequilibrium crystallization can be easily generalized for the description of other nonequilibrium transitions.

## Numerical Modeling of One-Dimensional Binary Solidification with a Mushy Layer Evolution

Daniel Lee<sup>1,\*</sup>, Dmitri Alexandrov<sup>2</sup> and H.-N. Huang<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Department of Applied Mathematics, Tunghai University, Taichung, Taiwan 40704.*

<sup>2</sup> *Ural Federal University, Department of Mathematical Physics, Lenin ave. 51, Ekaterinburg 620083, Russian Federation.*

Received 16 September 2010; Accepted (in revised version) 13 May 2011

Available online 27 March 2012

---

**Abstract.** The numerical modeling of a binary solidification with a mushy layer mechanism is considered in this manuscript. The nonlinear coupled system of equations describes the heat and mass diffusions of a one-dimensional spatial variable in the semi-infinite interval. Also formulated is a transformed system in a finite interval. We propose numerical methods for solving the nonlinear system using a threshold strategy based on fixed computation-domain approach. Our calculated results and those from the LeadEx field experiment are well-matched in their tendencies.

**AMS subject classifications:** 35K05, 65-05, 65M06

**Key words:** Direct numerical simulation, Heat and mass transfer, Mushy layer, Solidification, Stefan problem.

---

### 1. Introduction

Binary solidification of liquids has received considerable attention in the literature due to its wide applicability. If the liquid is an alloy (a mixture of two or more components), its crystallization process completely differs from the solidification process of a pure liquid. In particular, various distributions of impurity in the solid phase lead to different mechanical and physical properties of ingots. This phenomenon arises due to the impurity displacements in the melting process by the moving front of the solidification. If the impurity displacement is rather large, the constitutional supercooling originates ahead of the planar solid-liquid interface [23] and, generally speaking, the two-phase zone (mushy region) appears. Moreover, solid nuclei in the form of newly born crystals may evolve in this zone.

Mathematical descriptions of crystallization processes play a very important role in crystal growth [10, 26], engineering [33], oceanography [22] and metallurgy [12]. The mathematical models allow for the accurate predictions of the many properties of solids

---

\*Corresponding author. *Email addresses:* danlee@thu.edu.tw (D. Lee), Dmitri.Alexandrov@usu.ru (D. Alexandrov), nhuang@thu.edu.tw (H.-N. Huang)

# КОНВЕКТИВНАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ С ЗОНОЙ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

*Д. В. Александров, А. П. Малыгин\**

*Уральский государственный университет им. А. М. Горького  
620083, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 3 апреля 2010 г.  
после переработки 3 ноября 2010 г.

Аналитически исследована морфологическая неустойчивость процесса кристаллизации при наличии анизотропной и неоднородной области фазового перехода с учетом течения в жидкости и конвективного теплопереноса в двухфазной зоне. Рассмотрен механизм нарушения устойчивости процесса затвердевания, заключающийся в конвективном переносе тепла и примеси при течении жидкости по каналам области фазового перехода. Проведен линейный анализ морфологической устойчивости с учетом течения среды в жидкой фазе системы, диффузии примеси в двухфазной зоне и зависимости коэффициентов переноса от фазового состава. Определен параметр эволюции возмущений для анизотропной и неоднородной двухфазной зоны, получены кривые нейтральной устойчивости процесса. Показано, что учет диффузии примеси и увеличение неоднородности зоны фазового перехода расширяют область неустойчивости, а уменьшение анизотропии приводит к ее сужению. Найден новый критерий конвективно-морфологической неустойчивости процесса кристаллизации с двухфазной зоной, который существенно расширяет область неустойчивости при увеличении скорости течения жидкости.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Работы по изучению гидродинамической неустойчивости берут начало с 20-х гг. прошлого столетия. Первый пример ламинарного течения жидкости, которое при определенных условиях становилось неустойчивым, дал Тейлор [1]. Возникновение неустойчивости отвечает за разрушение одного режима течения жидкости и приводит к формированию нового при изменении управляющих процессом параметров системы. Устойчивость задач тепло- и массопереноса с подвижными границами типа Стефана впервые была исследована в классической работе Маллинза и Секерки [2] с помощью методов линейной теории гидродинамической устойчивости [3]. В работе [2] была изучена морфологическая устойчивость плоской границы раздела твердой и жидкой фаз — фронта кристаллизации — к малым возмущениям его формы. Критерий неустойчивости Маллинза – Секерки сводится к выполнению следующего неравенства:

$$(k_l + k_s)^{-1} \left[ k_l \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{h+} + k_s \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{h-} \right] < -m \left( \frac{\partial C}{\partial z} \right)_{h+}, \quad (1)$$

где  $T$  — температура,  $C$  — концентрация примеси,  $m$  — коэффициент наклона линии ликвидуса,  $k_l$  и  $k_s$  — коэффициенты теплопроводности в жидкой и твердой фазах,  $h$  — координата фронта кристаллизации, а индексы «+» и «-» соответствуют жидкости и твердой фазе (направления координатных осей см. ниже на рис. 1).

Вытеснение примеси плоской границей кристалл–расплав в глубь жидкой фазы и ее накопление перед фронтом приводят к возникновению концентрационного переохлаждения. Условие его образования, полученное Иванцовым [4], имеет вид

$$\left( \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{h+} < -m \left( \frac{\partial C}{\partial z} \right)_{h+}. \quad (2)$$

Концентрационное переохлаждение создает преимущественные условия для роста отдельных выступов твердой фазы в глубь жидкости и, таким образом, приводит к неустойчивости плоской границы разде-

\* E-mail: Alexey.Malygin@usu.ru



# КОММЕНТАРИЙ К СТАТЬЕ «СИММЕТРИЧНЫЙ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОС ВО ВРАЩАЮЩЕМСЯ СФЕРИЧЕСКОМ СЛОЕ», ЖЭТФ, том 121, вып. 3, 2002

Д. В. Александров\*, А. П. Малыгин

Уральский федеральный университет  
620083, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 4 сентября 2011 г.

Исправлены аналитические решения уравнений тепло-массопереноса, ранее полученные в статье [1]. Показано, что при этом изменяется зависимость скорости роста внутреннего ядра Земли от теплового потока.

Полученное в статье [1] аналитическое сферически-симметричное решение, описываемое выражениями (7), не удовлетворяет решаемым уравнениям (5), что легко показать при помощи подстановки массовой доли легкой компоненты  $\xi_r$  и удельной энтропии  $S_r$  из (7а) и (7б) или их производных  $\dot{\xi}_r$  и  $\dot{S}_r$  (соотношения, записанные выше (7а) в [1]) в уравнение (5б). Принципиальной оказывается неверно приведенная зависимость  $S_r$  от радиальной переменной  $r$  во втором слагаемом правой части выражения (7б). Правильный вид этой зависимости следующий:

$$S_r = S_o + \frac{qs}{T\rho\kappa} \left( \frac{r_o^2}{r} - r_o \right) + \frac{\dot{S}_r + \dot{S} + 3\bar{q}_o/r_o\rho T}{3\kappa} \times \\ \times \left( \frac{r^2}{2} + \frac{r_o^3}{r} - \frac{3r_o^2}{2} \right) + \frac{\mu''(\xi_r + \bar{\xi})}{6\kappa T} \times \\ \times \left( \frac{r^4}{10} - r_o^3 r - \frac{3r_o^5}{5r} + \frac{3r_o^4}{2} \right). \quad (1)$$

При этом выражение (7в) также изменится:

$$\dot{\xi}_r + \dot{\xi} = \left\{ \frac{qs}{T\rho} \frac{r_o^2}{r_i^2} - \frac{\bar{q}_o}{r_o T \rho} \left( r_i - \frac{r_o^3}{r_i^2} \right) - \right. \\ \left. - \frac{c_p}{3f_s} \left( f_{\xi} \dot{\xi} + \frac{f_s}{c_p} \dot{S} \right) \left( r_i - \frac{r_o^3}{r_i^2} \right) \right\} \times \\ \times \left\{ \frac{\mu''}{30T} \left( 2r_i^3 - 5r_o^3 + \frac{3r_o^5}{r_i^2} \right) + \right.$$

$$\left. + \left[ \frac{c_p}{3f_s} \left( \frac{\rho}{3\rho_i \Delta \xi r_i} \left( r_i - \frac{r_o^3}{r_i^2} \right) - f_{\xi} \right) - \frac{\Delta S}{3\Delta \xi} \right] \times \right. \\ \left. \times \left( r_i - \frac{r_o^3}{r_i^2} \right) \right\}^{-1}, \quad (2)$$

а формулы (7а) и (7г) будут иметь приведенный вид с учетом замены (7в) на выражение (2).

Откорректированные решения (1) и (2) приведут к новым значениям постоянных  $\xi_o$  и  $S_o$ , определяемых выражениями (8) в [1], а также к измененным зависимостям, показанным в работе [1] на рис. 1.

В формуле (36) в работе [1] пропущен множитель 1/3, а в выражение (37) неверно подставлены временные производные массовой доли легкой компоненты  $\dot{\xi}$  и удельной энтропии  $\dot{S}$  для исходного RS-состояния из (10а) и (10б). Правильный вид выражения (37) такой:

$$f_{\xi} \dot{\xi} + \frac{f_s}{c_p} \dot{S} = \dot{r}_i \frac{4\pi r_i^2 \rho_i}{M_o} \left[ f_{\xi} \bar{\xi} + \frac{f_s}{c_p T} (L - \mu \bar{\xi}) \right] - \\ - \frac{f_s}{c_p} \frac{4\pi r_o^2}{T M_o} (q_s + \bar{q}_o). \quad (3)$$

Выражение (38) работы [1] для определения скорости роста внутреннего ядра  $\dot{r}_i$  с учетом исправленных зависимостей (1)–(3) примет вид

\* E-mail: Dmitri.Alexandrov@usu.ru

**РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ**



**СВИДЕТЕЛЬСТВО**

о государственной регистрации программы для ЭВМ

**№ 2011615005**

**ConvectiveSolidification.mcd**

Правообладатель(ли): **Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уральский государственный университет им. А.М.Горького» (RU)**

Автор(ы): **Александров Дмитрий Валерьевич, Малыгин Алексей Павлович (RU)**

Заявка № **2011612971**  
Дата поступления **26 апреля 2011 г.**  
Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ  
**24 июня 2011 г.**

 Руководитель Федеральной службы по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам

 **Б.П. Симонов**



РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



## СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2012613680

SRDResearchTool

Правообладатель(ли): *Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» (RU)*

Автор(ы): *Зверев Владимир Сергеевич (RU)*



Заявка № 2012611255

Дата поступления 22 февраля 2012 г.

Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ  
19 апреля 2012 г.

Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности

Б.Л. Симонов

Копии дипломов кандидатов наук, защитившихся и утвержденных участников проекта





ДИПЛОМ ЯВЛЯЕТСЯ ДОКУМЕНТОМ  
ГОСУДАРСТВЕННОГО ОБРАЗЦА

Решение  
Высшей аттестационной комиссии  
Министерства образования и науки  
Российской Федерации  
о выдаче диплома

от 8 апреля 2011 г. № 156/37

Серия ДКН № 132049 \*

г. МОСКВА

Решением  
диссертационного совета

Уральского федерального университета  
имени Б. Н. Ельцина

от 19 ноября 2010 г. № 24

Червонойцевой Евгении Александровне

ПРИСУЖДЕНА УЧЕНАЯ СТЕПЕНЬ

КАНДИДАТА

физико-математических наук

Председатель  
диссертационного совета г. Ельцин

Кочетков